



**KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH**

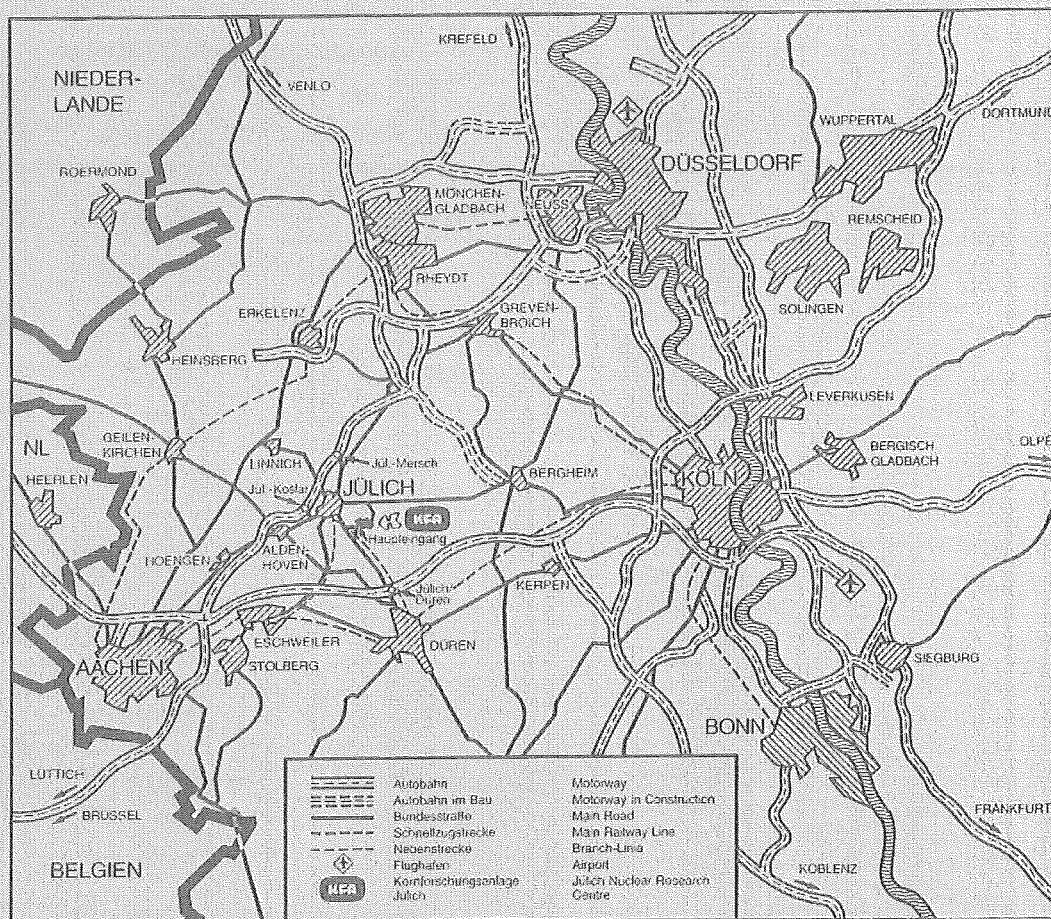
Institut für Kernphysik

**Die Subbarrierenfusion  
und die quantisierte  
adiabatische zeitabhängige  
Hartree-Fock Theorie**

von  
R. Gissler

Jül-Spez-340  
Dezember 1985  
ISSN 0343-7639





Als Manuskript gedruckt

**Spezielle Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 340**  
 Institut für Kernphysik Jüli-Spez-340

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH  
 Postfach 19 13 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)  
 Telefon: 02461/610 · Telex: 833556-0 kf d

**Die Subbarrierenfusion  
und die quantisierte  
adiabatische zeitabhängige  
Hartree-Fock Theorie**

von  
R. Gissler



## Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung	1
2. Theoretische Grundlagen zur quantenmechanischen und mikroskopischen Beschreibung von Schwerionenreaktionen	6
2.1 Die Generator-Koordinaten-Methode	6
2.2 Die quantisierte Adiabatische Zeitabhängige Hartree-Fock-Theorie (quant. ATDHF)	10
2.3 Die Entkopplungseigenschaften des kollektiven Pfades	14
2.4 Die Massenparameter	18
2.4a Allgemeines	18
2.4b ATDHF und Linear Response Masse	19
3. Formulierung der Theorie mit Skyrme-Kräften	24
3.1 Die Skyrme Wechselwirkung	24
3.2 Der kollektive Pfad	29
3.2.1 Der Hartree-Fock-Hamiltonoperator	30
3.2.2 Die adiabatische Näherung	32
3.3 Die Hartree-Fock Energie	36
3.4 Die Massenparameter	37
4. Numerische Methoden	40
4.1 Allgemeines	40
4.2 Die Berechnung des kollektiven Pfades	43
4.3 Die Berechnung der ATDHF-Masse im Linear Response Verfahren	47
4.4 Numerische Genauigkeit	51

	Seite
5. Die Subbarrierenfusion von $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ , $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ und $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$	54
5.1 Allgemeines	54
5.2 Die Subbarrierenfusion von $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}+^{32}\text{S}$ und die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung	57
5.3 Die Subbarrierenfusion von $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$	59
5.4 Die Bedeutung des $\alpha$ -Transfers in der Subbarrierenfusion	62
5.5 Konzeptioneller Vergleich von quantisierter ATDHF-Theorie und GCM-Theorie am Beispiel des Systems $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$	65
5.5a Der kollektive Pfad und die Massenparameter	65
5.5b Subbarrierenfusion für das System $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}+^{32}\text{S}$	67
6. Zusammenfassung und Schlußfolgerungen	69
Anhang A1: Die Thouless-Valatin Masse	72
Anhang A2: Die Äquivalenz von Linear Response und Thouless-Valatin-Masse	76
Anhang A3: Die GCM-Masse für Skyrme-Wechselwirkungen	80
Anhang B: Spinsättigung	81
Verzeichnis der Abbildungen	83
Literaturverzeichnis	87
Abbildungen	

## 1. Einleitung

Seit der Entdeckung der Kernspaltung im Jahre 1939 und der Entdeckung des Sternbrennens durch Fusion haben kollektive Kernprozesse großer Amplitude in besonderem Maße das Interesse der Kernphysiker auf sich gezogen. Solche Prozesse - neben den oben genannten auch noch allgemeine Schwerionenreaktionen, Vibrationen weicher Kerne - zeichnen sich dadurch aus, daß sich bei ihrem Ablauf die Wellenfunktion so grundlegend ändert, daß alle Näherungen, das System durch einzelne Einteilchenanregungen oder durch Vibrationen um Gleichgewichtszustände zu beschreiben, versagen.

Bei der theoretischen Beschreibung behalf man sich zunächst mit phänomenologischen Modellen. Beispiele dafür sind das Tröpfchenmodell, das Zwei-Zentren-Schalenmodell und die Annäherung der Wechselwirkung zwischen den beiden Ionen durch ein Woods-Saxon Potential.

Etwa seit 1975 befürchtete man in steigendem Maße, daß die Physik durch die Parameter verdeckt würde. Es entstand daher der Wunsch nach methodisch klar konzipierten mikroskopischen Vielteilchentheorien. Solch eine Theorie ist z.B. die zeitabhängige Hartree-Fock-Theorie (TDHF)<sup>1-4)</sup>. Weitere, auf der TDHF-Theorie basierende Modelle wurden von Villars<sup>5)</sup>, Baranger und Vénéroni<sup>6)</sup> sowie von Marumori<sup>7)</sup> entwickelt. Diese sind semiklassische Theorien, die keine quantenmechanischen Effekte, insbesondere keine spontane Spaltung und keine Subbarrierenfusion enthalten.

Für die quantenmechanische Beschreibung von kollektiven nuklearen Bewegungen großer Amplitude existieren neben den Pfad-Integral-Approximationen<sup>8-12)</sup> zwei Arten von Theorien: Generator-Koordinaten (GCM) ähnliche Modelle<sup>13-16)</sup> und adiabatische Methoden, wie die quantisierte adiabatische zeitabhängige Hartree-Fock-Theorie (ATDHF)<sup>17-21)</sup>.

Zu den Pfad-Integral-Approximationen gibt es bis jetzt noch keine numerischen Rechnungen. Wir werden daher unsere Untersuchung im Rahmen der ATDHF- und GCM-Theorie durchführen, die sich bereits in realistischen Anwendungen bewährt haben<sup>22-27</sup>).

Das Hauptziel dieser Arbeit ist die numerische Beschreibung der Fusion unterhalb der Barriere.

Die Motivation für das Studium der Fusion bei niedrigen Energien liegt in ihrer Bedeutung für die astrophysikalischen Brennprozesse im Verlauf der Sternentwicklung. Um z.B. Modelle der Nukleosynthese in Sternen zu überprüfen, benötigt man Fusionsquerschnitte bei solch niedrigen Energiebereichen, in denen Experimente mit großen Fehlern behaftet sind oder sogar ganz unmöglich sind. Deshalb bilden theoretische Beschreibungen die einzige Möglichkeit, zu zuverlässigen Aussagen zu gelangen.

Die Einschränkung auf Subbarrierenfusion ist hier außerdem konsequent, weil bei der Fusion oberhalb der Barriere zusätzliche dissipative Kräfte berücksichtigt werden müssen, deren Behandlung im Rahmen einer mikroskopischen Theorie noch nicht endgültig erfolgt ist.

Im Rahmen der GCM- und ATDHF-Theorie erfolgt die mikroskopische Beschreibung von kollektiven Kernprozessen großer Amplitude näherungsweise in einem aus Slaterdeterminanten bestehenden Unterraum des gesamten Hilbertraums. In diesem Unterraum wird mit geeigneten Methoden eine Familie von Slaterdeterminanten, der sog. kollektive Pfad, ausgewählt, der die Grundlage für die Beschreibung des kollektiven Prozesses bildet. Schon bei der Bestimmung des Pfades unterscheiden sich die Theorien beträchtlich. Das Besondere der quantisierten ATDHF-Theorie ist, daß hier, anders als z.B. in der Constrained-Hartree-Fock-



Theorie, keine a priori Annahmen über den kollektiven Pfad gemacht werden. Der kollektive ATDHF-Pfad wird vielmehr aus allgemeinen Variationsprinzipien parameterfrei abgeleitet und er ist darüber hinaus der optimale Pfad des Systems in dem Sinne, daß er maximal entkoppelt ist von den nichtkollektiven Freiheitsgraden.

Unter gewissen Annahmen kann auch in der GCM-Theorie eine Vorschrift zur Bestimmung des Weges hergeleitet werden. Dies führt zum Pfad des "steepest descent", der jedoch keine Entkopplungsbedingungen erfüllt.

Entlang des kollektiven Pfades werden die dynamischen Größen des Systems bestimmt, wie z.B. das Potential, die Massenparameter und die Trägheitsmomente, die zur Aufstellung des kollektiven Hamiltonoperators benötigt werden. Die zugehörige kollektive Schrödingergleichung wird als Streugleichung interpretiert und die Berechnung des Fusionsquerschnitts unterhalb der Barriere erfolgt dann parameterfrei mit Hilfe von verallgemeinerten WKB-Methoden im Rahmen des Barrierenpenetrationsmodells.

Die GCM- und die ATDHF-Theorie benötigen zur expliziten Berechnung nuklearer Systeme eine effektive Nukleon-Nukleon Wechselwirkung. Deren Koeffizienten sind die einzig freien Parameter der Theorie an sich. Wir wählen als Wechselwirkung die Skyrme-Kraft ohne Spin-Bahn Kopplungsterm mit einem direkten Coulomb-Anteil<sup>28)</sup>. Die Skyrme-Wechselwirkung wurde ausgewählt, weil sie über den ganzen Bereich der nuklearen Massentafel gültig ist und weil sie Grundzustände sowie angeregte Zustände von Kernen gleichermaßen gut beschreibt.

Der beste Beweis für die Richtigkeit einer Theorie ist natürlich die Übereinstimmung mit dem Experiment. Bei Systemen von zwei deformierten Fragmenten ist eine solche Übereinstimmung nur sehr schwer zu erreichen, da komplizierte

Drehimpulsprojektionsverfahren erforderlich sind und zudem noch mehrere relative Orientierungen der Ionen zueinander berücksichtigt werden müssen. Daher ist es günstiger, zunächst Systeme von zwei sphärischen Kernen wie z.B.  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  oder  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  zu betrachten. Es ist daher zu untersuchen, ob die Skyrme-Kraft in der Lage ist, experimentelle Fusionsquerschnitte für die Subbarrierenfusion dieser Systeme zu reproduzieren.

Bei Verwendung verschiedener Skyrme-Wechselwirkungen zeigt sich deren Einfluß auf Lage und Höhe der Barriere und somit auf den berechneten Fusionsquerschnitt. Damit ist es dann möglich, durch Vergleich mit dem Experiment eine Aussage über die Güte der Parametrisierungen zu treffen.

Im Zusammenhang mit der Subbarrierenfusion von Schwerionensystemen existieren theoretische Hinweise und Vermutungen<sup>29,30)</sup> für die Bedeutung von Transferfreiheitsgraden. Da die ATDHF-Theorie alle möglichen Reaktionskanäle berücksichtigt und daher auch eine beliebige Massenverteilung des Systems im Verlauf der Kollision erlaubt, ist zu erwarten, daß ein potentiell möglicher Teilchentransfer auch durch die Theorie beschrieben wird und sich in dem Ergebnis für den Fusionsquerschnitt niederschlägt. Wir untersuchen diese Frage am Beispiel des aus zwei deformierten Kernen mit offenen Schalen bestehenden Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , das einen  $\alpha$ -Transfer zuläßt. Es wird sich zeigen, daß er auch auftritt und daher konstruieren wir zu Vergleichszwecken eine Sudden Näherung, in der Hartree-Fock Wellenfunktionen einfach bei verschiedenen relativen Entfernungen übereinandergeschoben werden, während ihre innere Struktur unverändert bleibt. Dadurch kann dann ein Vergleich von ATDHF- und Sudden-Theorie den Einfluß von Transferreaktionen sichtbar machen.

ATDHF- und GCM-Theorie haben sich bei vielen Anwendungen auf Schwerionensysteme bewährt. Die ATDHF-Theorie besitzt prinzipielle Vorteile wie den optimalen,

d.h. maximal entkoppelten kollektiven Pfad und die asymptotisch korrekte Masse der Relativbewegung. Das numerische Verfahren zur Lösung der ATDHF-Gleichungen ist jedoch sehr zeitaufwendig. Daher stellt sich die Frage, ob es sich lohnt, solch einen Aufwand zu treiben. Es ist somit ein weiteres Ziel der Arbeit, diese Frage für eine realistische Schwerionenreaktion numerisch zu untersuchen.

Zu diesem Zweck diskutieren wir neben dem ATDHF-Pfad den Gradienten-Pfad (steepest descent), der in der GCM-Theorie bestimmt wird. Es ist bekannt, daß die GCM-Massenparameter im asymptotischen Bereich nicht die korrekten Werte erreichen. Daher ist es erforderlich, die Massenberechnung entlang des Gradienten-Pfades zu verbessern. Als Lösung bietet es sich an, ein Iterationsverfahren zur Berechnung der Masse in der Linear Response Theorie zu entwickeln. Die Linear Response Massen entsprechen den Thouless-Valatin-Massen und sind asymptotisch korrekt.

Der Vergleich zwischen den Potentialen und Massenparametern entlang des kollektiven Pfades wird für das System  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  durchgeführt. Dieses System wird wegen des  $\alpha$ -Transfers einen sehr interessanten Fall darstellen.

Die numerischen Rechnungen werden auf dreidimensionalen Orts- und Impulsraumgittern durchgeführt. Die Berechnung der Systeme  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  und  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  erfolgte auf der IBM 3033 und 3081; die Berechnung des Systems  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  erfolgte auf der Cray X-MP2 der Kernforschungsanlage Jülich GmbH.

## 2. Theoretische Grundlagen zur quantenmechanischen und mikroskopischen Beschreibung von Schwerionenreaktionen

### 2.1 Die Generator-Koordinaten-Methode

In der üblichen Formulierung der Ein-Parameter-Generator-Koordinaten-Methode (GCM)<sup>15,16)</sup> wird der Hamiltonoperator  $H$  des Gesamtsystems in einem Unterraum diagonalisiert. Dieser Unterraum ist der Raum, der durch die Slaterdeterminanten des kollektiven Pfades aufgespannt wird. Die Slaterdeterminanten  $|\phi_q\rangle$  sind zeit-gerade Funktionen einer reellen Koordinate  $q$ . Die  $|\phi_q\rangle$  beschreiben die Änderung des Systems während der Kollision; die Koordinate  $q$  wird so gewählt, daß sie im asymptotischen Bereich gleich der Clusterentfernung ist.  $q$  kann z.B. aus dem Quadrupolmoment bestimmt werden. Die stationäre Wellenfunktion des A-Teilchensystems ist dann gegeben als lineare Superposition der  $|\phi_q\rangle$ :

$$|\psi^{GCM}\rangle = \int dq f(q) |\phi_q\rangle \quad (2.1)$$

Der kollektive Pfad  $\{|\phi_q\rangle\}$  und die Wichtungsfunktion  $f(q)$  werden durch eine doppelte Variationsmethode bestimmt. Dabei wird verlangt, daß der Energieerwartungswert im Zustand  $|\psi^{GCM}\rangle$  stationär ist unter Variationen von  $f(q)$  und  $|\phi_q\rangle$ :

$$\delta \langle \psi^{GCM} | H - E | \psi^{GCM} \rangle = 0 \quad (2.2)$$

Die Variation wird durchgeführt in der Gaußschen Überlapp Näherung (GOA) für den Norm- und Hamiltonüberlapp. Man erhält dann für die Variation nach  $|\phi_q\rangle$ <sup>18)</sup>:

$$\langle \delta \phi_q | H - \frac{\partial V}{\partial q} Q | \phi_q \rangle = 0 \quad (2.3)$$

Diese Gleichung für den kollektiven Pfad entspricht einer Constrained-Hartree-Fock-Gleichung mit dem Constraining Operator  $Q$ . Gl. (2.3) wird mit der Gradienten-Methode gelöst. Dabei ist man an einem Minimum der Energieoberfläche  $V(q)$  interessiert. Daher sucht man für ein vorgegebenes  $|\phi_0\rangle$  die Richtung der stärksten Neigung (steepest descent) und folgt dieser Richtung iterativ bis zum Minimum. Den steepest descent erhält man über die für Slaterdeterminanten gültige Relation  $Q|\phi_q\rangle = \tilde{c}(q)(\partial V/\partial q)^{-1}|\phi_q\rangle$ . Damit ergibt sich aus (2.3) mit  $c(q) = \tilde{c}(q)(\partial V/\partial q)^{-1}$ :

$$\frac{\partial}{\partial q} |\phi_q\rangle = c(q) H_{ph} |\phi_q\rangle \quad (2.4)$$

Dabei ist  $H_{ph}$  der 1 Teilchen-1 Loch und 1 Loch-1 Teilchen Anteil des Hamiltonoperators  $H$  bezüglich  $|\phi_q\rangle$ . (2.4) läßt sich weiter umformen:

$$|\phi_{q+\delta q}\rangle = (1 - \delta q c(q) H_{ph}) |\phi_q\rangle \quad (2.5)$$

Wir wählen  $\delta q c(q) = \text{const} = \epsilon$ . Wir lösen Gl. (2.5) in endlichen Schritten mit einer diskreten Reihe von Punkten  $q_n$  und zugehörigen Zuständen  $|\phi_{q_n}\rangle$ . Dann erhalten wir:

$$|\phi_{q_{n+1}}\rangle = \{1 - \epsilon H_{ph}^{(n)}\} |\phi_{q_n}\rangle \quad (2.6)$$

Den kollektiven Hamiltonoperator erhält man durch Variation von Gl. (2.2) nach der Wichtungsfunktion  $f(q)$  bei gegebenem  $\phi_q$ . Das Resultat ist eine Integralgleichung, die Hill-Wheeler Gleichung<sup>31)</sup>. Sie kann, z.B. unter der Annahme der Gaußschen Überlapp Näherung, in eine Differentialgleichung, die kollektive Schrödingergleichung, transformiert werden<sup>20)</sup>:



$$H_C^{GCM}(q, i\hbar \frac{d}{dq})g(q) = E g(q) \quad (2.7)$$

mit

$$g(q) = \int dq' [\langle \phi_q | \phi_{q'} \rangle]^{1/2} f(q') \quad (2.7a)$$

Im Falle einer Schwerionenkollision wird die kollektive Koordinate gewöhnlich so gewählt, daß  $q$  die Entfernung zwischen den Fragmenten beschreibt. Da bei einer solchen Kollision deformierte Zustände des Gesamtsystems auftreten, muß man Rotationen des Systems berücksichtigen. Diese können durch geeignete Nullpunktsenergien und Zentrifugalterme einbezogen werden. Werden zusätzlich noch spuriose Translationen berücksichtigt, so erhält man unter der Voraussetzung axialsymmetrischer Wellenfunktionen den folgenden Ausdruck für den kollektiven Hamiltonoperator<sup>25)</sup>:

$$\begin{aligned} H_{C,L}^{GCM}(q, i\hbar \frac{d}{dq}) = & -\frac{1}{4} \left\{ \frac{d^2}{dq^2} \frac{\hbar^2}{2M_{(q)}^{GCM}} + \frac{d}{dq} \frac{\hbar^2}{M_{(q)}^{GCM}} \frac{d}{dq} + \frac{\hbar^2}{2M_{(q)}^{GCM}} \frac{d^2}{dq^2} \right\} \\ & + V(q) - Z(q) + \frac{\hbar^2}{2\theta_{(q)}^{GCM}} L(L+1) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Der kollektive Massenparameter ist gegeben durch

$$\frac{1}{M_{(q)}^{GCM}} = \frac{\langle \phi_q | \{P, \{H, P\}\} | \phi_q \rangle}{4 \langle \phi_q | P^2 | \phi_q \rangle^2} \quad (2.9)$$

mit

$$P | \phi_q \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial q} | \phi_q \rangle \quad (2.10)$$

$V(q)$  ist das klassische Potential, definiert durch:

$$V(q) = \langle \phi_q | H | \phi_q \rangle \quad (2.11)$$

Die Quantenkorrekturen  $Z(q)$  enthalten die kinetische und potentielle Nullpunktsenergie entlang des kollektiven Pfades sowie eine näherungsweise Projektion auf Drehimpuls  $L=0$  und Translationsimpuls  $K=0$ :

$$Z(p) = Z_{\text{kin}}(q) + Z_{\text{pot}}(q) + Z_{\text{rot}}(q) + Z_{\text{trans}}(q) \quad (2.12)$$

mit

$$Z_{\text{kin}}(q) = \frac{\hbar^2}{2M_{\text{GCM}}(q)} \langle \phi_q | \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial q} | \phi_q \rangle \quad (2.13)$$

$$Z_{\text{pot}}(q) = \frac{1}{8 \langle \phi_q | P^2 | \phi_q \rangle} \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \quad (2.14)$$

$$Z_{\text{rot}}(q) = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2\theta_{i(q)}^{\text{GCM}}} \langle \phi_q | (J_{\text{ph}}^{(i)})^2 | \phi_q \rangle \quad (2.15)$$

$$Z_{\text{trans}}(q) = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2M_{i(q)}^{\text{GCM}}} \langle \phi_q | \nabla_{\text{ph}}^{(i)} \nabla_{\text{ph}}^{(i)} | \phi_q \rangle \quad (2.16)$$

Die Trägheitsmomente für Translation und Rotation,  $M_i^{\text{GCM}}$  und  $\theta_i^{\text{GCM}}$ , sollten aus Konsistenzgründen in der Peierls-Yoccoz Näherung<sup>32)</sup> berechnet werden. Dies entspricht der GCM-Näherung (2.7). Es ist ein Nachteil der Ein-Parameter-GCM, daß ihre Massenparameter nicht den korrekten Wert  $M=mA$  für eine reine Translation des A-Teilchensystems bzw.  $M=\mu$  (reduzierte Masse) für eine reine Relativbewegung ergeben. Darüber hinaus ist der kollektive Gradientenpfad nicht maximal entkoppelt von den nicht-kollektiven Freiheitsgraden. Beide Nachteile treten in der quantisierten Adiabatischen Zeitabhängigen Hartree-Fock-Theorie (quant. ATDHF) nicht auf.

## 2.2 Die quantisierte Adiabatische Zeitabhängige Hartree-Fock-Theorie (quant. ATDHF)

Die stationäre Wellenfunktion des A-Teilchensystems  $|\psi^{\text{ATDHF}}\rangle$  wird aus einer linearen Superposition von Slaterdeterminanten  $|\phi_{qp}\rangle$  gebildet. Die Slaterdeterminanten werden mit einem Paar von konjugierten kollektiven Parametern  $q$  und  $p$  bezeichnet. Es gilt<sup>25)</sup>:

$$|\psi^{\text{ATDHF}}\rangle = \int dq dp f(q,p) |\phi_{qp}\rangle \quad (2.17)$$

In der adiabatischen Näherung schreibt man die Slaterdeterminanten wie folgt:

$$|\phi_{qp}\rangle = (q + ip Q(q)) |\phi_q\rangle \quad (2.18)$$

Dabei sind die  $|\phi_q\rangle$  zeit-gerade Slaterdeterminanten (die  $|\phi_{qp}\rangle$  sind zeit-ungerade) und  $Q$  ist ein hermitescher und zeit-gerader 1 Teilchen-1 Loch Operator. Wie im Fall der Ein-Parameter-GCM werden der kollektive Pfad  $\{|\phi_q\rangle\}$ , die Wichtungsfunktion  $f(q,p)$  sowie der Operator  $Q(q)$  bestimmt, indem gefordert wird, daß der Energieerwartungswert stationär ist bezüglich Variation nach  $|\phi_q\rangle$  und nach  $f(q,p)$ <sup>18,20)</sup>:

$$\delta \langle \psi^{\text{ATDHF}} | H - E | \psi^{\text{ATDHF}} \rangle = 0 \quad (2.19)$$

Die Variation bezüglich  $|\phi_q\rangle$  ergibt:

$$\langle \delta \phi_q | H - \frac{\partial V}{\partial q} Q(q) | \phi_q \rangle = 0 \quad (2.20)$$

$$\langle \delta \phi_q | [H, Q(q)] + \frac{i\hbar}{M^{\text{ATDHF}}(q)} P(q) | \phi_q \rangle = 0 \quad (2.21)$$

mit dem hermiteschen und zeit-ungeraden Operator P gegeben durch:

$$P(q)|\phi_q\rangle = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial q}\right)_{ph}|\phi_q\rangle \quad (2.22)$$

Die Operatoren Q und P erfüllen die folgende Normierungsbedingung:

$$\langle\phi_q|[Q(q),P(q)]|\phi_q\rangle = i\hbar \quad (2.23)$$

Das klassische Potential ist definiert durch

$$V(q) = \langle\phi_q|H|\phi_q\rangle \quad (2.24)$$

und der ATDHF Massenparameter  $M^{ATDHF}$  ist gegeben durch

$$\frac{\hbar^2}{M^{ATDHF}(q)} = \langle\phi_q|[Q(q),[H,Q(q)]]|\phi_q\rangle \quad (2.25)$$

Die ATDHF-Gleichungen (2.20) und (2.21) können zu einer einzigen nichtlinearen Differentialgleichung von erster Ordnung in q umformuliert werden:

$$\frac{\partial}{\partial q}|\phi_q\rangle = c(q)[H,H_{ph}]_{ph}|\phi_q\rangle \quad (2.26)$$

mit

$$c(q) = \left(\frac{\partial V}{\partial q}\right)^{-1} \frac{M^{ATDHF}(q)}{\hbar^2} \quad (2.27)$$

Der Operator Q kann mittels  $H_{ph}$  ausgedrückt werden:

$$Q = \left(\frac{\partial V}{\partial q}\right)^{-1} H_{ph} \quad (2.28)$$

$H_{ph}$  ist hier wiederum der 1 Teilchen-1 Loch und 1 Loch-1 Teilchen Anteil des Hamiltonoperators  $H$  bezüglich  $|\phi_q\rangle$ .

Die Differentialgleichung (2.26) ist die sog. ATDHF-Gleichung. Sie benötigt eine Anfangsbedingung. Diese erhält man durch die Forderung nach minimaler Kopplung zwischen kollektiven und intrinsischen Freiheitsgraden. Der Grad der Kopplung wird durch die validity-Bedingung angegeben (s. Abschnitt 2.3). Aus der Erfahrung weiß man, daß der kollektive Pfad, der an einem Sattelpunkt startet, die minimale Kopplung aufweist und damit der optimale Pfad ist<sup>25,36</sup>).

Die ATDHF-Gleichung (2.26) wird in endlichen Schritten gelöst, indem  $\delta q \cdot c(q) = -\epsilon$  gewählt wird. Dann erhält man die folgende Gleichung für den ATDHF-Pfad:

$$|\phi_{q_{n+1}}\rangle = \{1 - \epsilon [H, H_{ph}^{(n)}]_{ph}^{(n)}\} |\phi_{q_n}\rangle \quad (2.29)$$

Nach Variation von (2.19) bezüglich  $f(q,p)$  erhalten wir die Hill-Wheeler-Gleichung für  $f(q,p)$ . Wegen der Eigenschaften des ATDHF-Pfades kann diese Gleichung unter der Annahme der Gaußschen Überlapp Näherung in eine kollektive Schrödingergleichung transformiert werden, die als kollektive Variable lediglich  $q$  enthält<sup>20</sup>):

$$H_{C,L}^{ATDHF}(q, i\hbar \frac{d}{dq}) g(q) = E g(q) \quad (2.30)$$

mit

$$\begin{aligned} H_{C,L}^{ATDHF}(q, i\hbar \frac{d}{dq}) = & -\frac{1}{4} \left\{ \frac{d^2}{dq^2} \frac{\hbar^2}{2M_{(q)}^{ATDHF}} + \frac{d}{dq} \frac{\hbar^2}{M_{(q)}^{ATDHF}} \frac{d}{dq} + \frac{\hbar^2}{2M_{(q)}^{ATDHF}} \frac{d^2}{dq^2} \right\} \\ & + V(q) - Z(q) + \frac{\hbar^2}{2\theta_{(q)}^{ATDHF}} L(L+1) \end{aligned} \quad (2.31)$$



Was die Nullpunktsenergien und den Zentrifugalterm angeht, so sind wir analog zur GCM-Theorie in Teil 2.1 vorgegangen. Die kollektive Wellenfunktion  $g(q)$  ist durch Gl. (2.7a) gegeben.

Wiederum steht  $Z(q)$  für die Quantenkorrekturen und enthält die kinetischen und potentiellen Nullpunktsenergien entlang des kollektiven Pfades sowie eine näherungsweise Projektion auf Drehimpuls  $L=0$  und Translationsimpuls  $K=0$ :

$$Z(q) = Z_{\text{kin}}(q) + Z_{\text{pot}}(q) + Z_{\text{rot}}(q) + Z_{\text{trans}}(q) \quad (2.32)$$

mit

$$Z_{\text{kin}}(q) = \frac{\hbar^2}{2M_{\text{ATDHF}}^{(q)}} \langle \phi_q | \frac{\delta}{\delta q} \frac{\delta}{\delta q} | \phi_q \rangle \quad (2.33)$$

$$Z_{\text{pot}}(q) = \frac{1}{2} \langle \phi_q | Q^2(q) | \phi_q \rangle \frac{\partial^2 V}{\partial q^2} \quad (2.34)$$

$$Z_{\text{rot}}(q) = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2\theta_{\text{ATDHF}}^{(q)}} \langle \phi_q | (J_{\text{ph}}^{(i)})^2 | \phi_q \rangle \quad (2.35)$$

$$Z_{\text{trans}}(q) = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2M_{\text{ATDHF}}^{(q)}} \langle \phi_q | \nabla_{\text{ph}}^{(i)} \nabla_{\text{ph}}^{(i)} | \phi_q \rangle \quad (2.36)$$

Die ATDHF-Vorschrift der Trägheitsmomente für Translation und Rotation entspricht einer einfachen Verallgemeinerung der Thouless-Valatin Formel<sup>33)</sup> auf Nichtgleichgewichtszustände. In Kapitel 3 werden wir zeigen, wie diese Massen berechnet werden.

### 2.3 Die Entkopplungseigenschaften des kollektiven Pfades

Zur Untersuchung der Entkopplungseigenschaften des kollektiven ATDHF-Pfades benennen wir die kollektiven Koordinaten  $q, p$  aus Gl. (2.17) als  $q_0, p_0$  und betrachten sie als Teil einer vollständigen Indizierung der Menge der Slaterdeterminanten:

$$|\phi(q, p)\rangle = |\phi(q_0, q_1, \dots, p_0, p_1, \dots)\rangle \quad (2.37)$$

Die Indizes  $q$  und  $p$  können so gewählt werden, daß

$$H(q, p) = \langle \phi(q, p) | H | \phi(q, p) \rangle \quad (2.38)$$

einer klassischen Hamiltonfunktion entspricht. Weiterhin sind die hermiteschen erzeugenden Operatoren  $Q_\alpha$  (zeit-gerade) und  $P_\alpha$  (zeit-ungerade) gegeben durch:

$$Q_\alpha(q, p) |\phi(q, p)\rangle = -i \left( \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \right)_{ph} |\phi(q, p)\rangle \quad (2.39a)$$

$$P_\alpha(q, p) |\phi(q, p)\rangle = i \left( \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \right)_{ph} |\phi(q, p)\rangle \quad (2.39b)$$

Sie erfüllen die folgenden Kommutatorrelationen:

$$\langle \phi(q, p) | [Q_\alpha(q, p), P_\beta(q, p)] | \phi(q, p) \rangle = i \delta_{\alpha\beta} \quad (2.40a)$$

$$\langle \phi(q, p) | [Q_\alpha(q, p), Q_\beta(q, p)] | \phi(q, p) \rangle = 0 \quad (2.40b)$$

$$\langle \phi(q, p) | [P_\alpha(q, p), P_\beta(q, p)] | \phi(q, p) \rangle = 0 \quad (2.40c)$$

Unter der Annahme eines eindimensionalen zeit-geraden Pfades  $|\phi(q_0, q_1=0, \dots, p_0=0, p_1=0, \dots)\rangle$  mit der Koordinate  $q_0$  und den zugehörigen Operatoren  $Q_0, P_0$  entwickeln wir die Hamiltonfunktion (2.38) in eine Reihe nach  $\delta p_\alpha$ . Bis zur zweiten Ordnung in  $\delta p_0$  gilt<sup>34,35</sup>):

$$H(q_0, \delta q_1, \dots, \delta p_0, \delta p_1, \dots) = V(q_0) + \frac{\delta^2 p_0}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq 0} \delta p_0 \delta p_\alpha \frac{\partial^2 H}{\partial p_0 \partial p_\alpha} + \frac{1}{3!} \sum_{\alpha \neq 0} \delta^2 p_0 \delta p_\alpha \frac{\partial^3 H}{\partial^2 p_0 \partial p_\alpha} \quad (2.41)$$

Die Kopplungsterme lauten dabei:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial p_0 \partial p_\alpha} = i \frac{\partial V}{\partial q_0} \langle \phi | [Q_\alpha, \frac{\partial Q_0}{\partial p_0}] | \phi \rangle \quad (2.42a)$$

$$\frac{\partial^3 H}{\partial^2 p_0 \partial q_\alpha} = \langle \phi | [P_\alpha, i [Q_0, [H, Q_0]] - [H, \frac{\partial Q_0}{\partial p_0}] + \frac{2i}{M} \frac{\partial Q_0}{\partial q_0}] | \phi \rangle \quad (2.42b)$$

Die Slaterdeterminante  $|\phi\rangle$  ist in zweiter Ordnung gegeben durch:

$$|\phi(q_0, p_0)\rangle = (1 + i p_0 Q_0(q_0) - \frac{1}{2} p_0^2 Q_0^2 + i p_0^2 \frac{\partial Q_0}{\partial p_0}) |\phi(q_0)\rangle \quad (2.43)$$

Wir können die Störungsgröße  $\partial Q_0 / \partial p_0$  bestimmen, indem wir (2.42b) = 0 setzen, d.h.

$$(i [Q_0, [H, Q_0]] + \frac{2i}{M} \frac{\partial Q_0}{\partial q_0} - [H, \frac{\partial Q_0}{\partial p_0}])_{ph}^\perp = 0 \quad (2.44)$$

Dann ist der Kopplungsterm (2.42a) nur dann klein für alle  $\alpha$ , wenn  $\partial Q_0 / \partial p_0$  klein ist. D.h. der kollektive Pfad (2.43) ist in zweiter Ordnung in  $\delta p_0$  genau dann maximal entkoppelt von den nicht-kollektiven Freiheitsgraden, wenn gilt:

$$p_0^2 \left\| \frac{\partial Q_0^\perp}{\partial p_0} \right\| \ll 1 \quad (2.45)$$

$\partial Q_0^\perp / \partial p_0$  wird dabei aus (2.44) bestimmt. Wie man zeigen kann, ist der ATDHF-Pfad, der vom Sattelpunkt aus startet, derjenige Pfad, der die validity-Bedingung (2.45) am besten erfüllt<sup>36)</sup>.

Man sieht aus Gl. (2.44), daß beim ATDHF-Pfad die Masse eine Bedeutung bei der Bestimmung des kollektiven Pfades hat und damit auch für die Entkopplung wichtig ist.

Dies ist ein wesentlicher Unterschied zum Gradienten-Verfahren, bei dem zwar auch eine Masse entlang des Pfades berechnet wird, diese aber keinen Einfluß bei der Bestimmung des kollektiven Pfades hat. Der Pfad ist nach der Methode der stärksten Neigung lediglich eine Möglichkeit, auf schnellstem Weg zum Hartree-Fock Minimum zu gelangen.

Um zu zeigen, daß der Gradienten-Pfad (2.6) tatsächlich dem steepest descent Verfahren entspricht, betrachten wir die Abhängigkeit der Energie  $V$  (Gl. (2.11)) von einer Variation  $|\delta\phi\rangle = \sum_{mi} C_{mi} a_{mi}^\dagger |\phi\rangle$  der Slaterdeterminante  $|\phi\rangle$ . Es gilt in erster Ordnung.

$$\delta V = \langle \phi + \delta\phi | H | \phi + \delta\phi \rangle - \langle \phi | H | \phi \rangle = \langle \delta\phi | H | \phi \rangle + \langle \phi | H | \delta\phi \rangle \quad (2.46)$$

Steepest descent bedeutet, daß  $\delta V$  maximal ist; d.h. wenn gilt:

$$|\delta\phi\rangle = H_{ph} |\phi\rangle \quad (2.47a)$$

Die Energieänderung soll zwar in der Richtung der stärksten Neigung erfolgen, aber nicht so stark, daß der nächste Wert über das Hartree-Fock-Minimum hin-

ausschießt. Daher führen wir einen Faktor  $\epsilon$  ein, der die Stabilität der Iteration bewirken soll:

$$|\delta\phi\rangle = \epsilon H_{ph}|\phi\rangle \quad (2.47b)$$

Mit  $|\delta\phi\rangle = |\phi+\delta\phi\rangle - |\phi\rangle$  gilt dann für den steepest descent:

$$|\phi+\delta\phi\rangle = (1-\epsilon H_{ph})|\phi\rangle \quad (2.48)$$

Diese Gleichung entspricht genau der Gl. (2.6) für den Gradienten-Pfad.



## 2.4 Die Massenparameter

### 2.4a Allgemeines

Entlang des kollektiven Gradienten- bzw. ATDHF-Pfades können verschiedene Massenparameter berechnet werden. Es sind dies die kollektive Masse der Relativbewegung  $M^{\text{GCM}}$  bzw.  $M^{\text{ATDHF}}$ , die Masse für Translationen in  $x,y,z$ -Richtung  $M_x, M_y, M_z$  und das Trägheitsmoment für Rotationen um die  $x,y,z$ -Achse  $\theta_x, \theta_y, \theta_z$ . Die nuklearen Trägheitsmomente wurden erstmals bei der Beschreibung von Rotationspektren benötigt. Von Inglis<sup>37)</sup> wurde das semiklassische und mikroskopische Cranking-Modell zur Berechnung von Trägheitsmomenten vorgeschlagen. Dabei legt man zugrunde, daß sich die Nukleonen als unabhängige Teilchen in einem mittleren Potentialtopf bewegen, welcher sich seinerseits mit konstanter Winkelgeschwindigkeit um eine feste Achse dreht. Von Belyaev<sup>38)</sup> wurde das Cranking-Modell durch die Berücksichtigung der Paarkorrelationen erweitert. Thouless und Valatin<sup>33)</sup> bestimmten das rotierende Potential selbstkonsistent im Rahmen der Hartree-Fock Theorie; ihr Modell wird deshalb auch selbstkonsistentes Cranking-Modell genannt. Das Thouless-Valatin Verfahren liefert einen Korrekturterm zur Inglis-Cranking-Formel, der den Einfluß der Restwechselwirkung beschreibt (s. Anhang A1). Eine weitere Methode zur Berücksichtigung der Restwechselwirkung ist das Linear Response Verfahren<sup>15)</sup>. Man kann zeigen, daß die Thouless-Valatin und die Linear Response Massenparameter äquivalent sind (s. Anhang A2).

Einen anderen Weg zur Berechnung schlugen Peierls und Yoccoz<sup>32)</sup> ein; sie benutzten Projektionstechniken. Die Peierls-Yoccoz Massenparameter sind äquivalent zu den GCM-Massenparametern bei Annahme der Gaußschen Überlapp-Näherung. Bei der Anwendung der verschiedenen Methoden auf Translationsmassen, die ja im Gegensatz zu den Rotationsträgheitsmomenten a priori bekannt sind, zeigte

sich, daß die Peierls-Yoccoz bzw. GCM Massen falsch waren, während die Thouless-Valatin bzw. Linear Response Massen den richtigen Wert erreichten. Bei Schwerionenreaktionen können die Massenparameter in der asymptotischen Gegend getestet werden, wo z.B. für die Masse der Relativbewegung die reduzierte Masse  $\mu$  herauskommen muß und die Translationsmasse z.B. in x-Richtung den Wert der Gesamtmasse  $m_A$  ergeben müßte. Auch hier zeigte sich, daß die GCM Masse asymptotisch falsch ist, während die ATDHF Masse (die ja ebenfalls eine Linear Response Masse ist) den asymptotisch richtigen Wert ergibt.

Das bedeutet, daß die Linear Response Massen (ATDHF, Thouless-Valatin) den GCM (Peierls-Yoccoz) Massen vorzuziehen sind. Ein wesentlicher Teil dieser Arbeit ist es daher, Linear Response Massen für alle Massenparameter entlang der kollektiven Gradienten- und ATDHF-Pfade zu berechnen und die Unterschiede gegenüber den entsprechenden GCM Massen aufzuzeigen.

Im folgenden werden nun die verschiedenen Methoden zur Massenberechnung präsentiert und insbesondere der Zusammenhang zwischen Linear Response Masse, Thouless-Valatin Masse und ATDHF Masse deutlich gemacht.

#### 2.4b ATDHF und Linear Response Masse

Die Berechnung von Linear Response Massen im Rahmen der ATDHF-Theorie wurde von Villars<sup>5)</sup> vorgestellt. Wir werden hier seine Überlegungen am Beispiel des Trägheitsmomentes bei Rotationen um die x-Achse vorstellen.  $\phi_0$  sei der Hartree-Fock Zustand eines deformierten Kerns von axialer Symmetrie.  $\phi_0$  ist zeitgerade und ein Eigenzustand von  $J_z$  mit dem Eigenwert 0.  $\phi_0$  ist invariant bei jeder Rotation mit dem Winkel  $\pi$  um eine Achse senkrecht zur z-Achse. Wir wählen als Rotationsachse die x-Achse.

Die ATDHF-Gleichungen (2.20) bis (2.23) sind auch hier gültig. Anstelle der Relativbewegung beschreiben sie hier aber eine Rotation. Die kollektive Koordinate  $q$  ist daher durch den Drehwinkel  $\alpha$  gegeben. Eine statische Rotation mit einem Winkel  $\alpha$  um die  $x$ -Achse wird dargestellt durch:

$$\phi(\alpha) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \alpha J^x\right\} \phi_0 \quad (2.49)$$

Die Gl. (2.22) für den Operator  $P$  lautet dann

$$P \phi(\alpha) = i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} [\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \alpha J^x\right\} \phi_0] = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar}\right) J^x \phi(\alpha) \quad (2.50)$$

$$\Rightarrow P \phi(\alpha) = J^x \phi(\alpha) \quad (2.51)$$

Die ATDHF-Gleichungen (2.20), (2.21) und (2.23) lauten dann:

$$\langle \phi(\alpha) | [Q(\alpha), J^x] | \phi(\alpha) \rangle = i\hbar \quad (2.52a)$$

$$\langle \delta \phi(\alpha) | H - \frac{\partial V}{\partial \alpha} Q(\alpha) | \phi(\alpha) \rangle = 0 \quad (2.52b)$$

$$\langle \delta \phi(\alpha) | [H, Q(\alpha)] + \frac{\hbar i}{\theta_x} J^x | \phi(\alpha) \rangle = 0 \quad (2.52c)$$

Der Trägheitsparameter der Bewegung ist das Trägheitsmoment  $\theta_x$ . Wegen der axialen Symmetrie ist  $\frac{\partial V}{\partial \alpha} = 0$ . Das heißt, daß Gl. (2.52b) nicht zur Bestimmung von  $Q$  herangezogen werden kann. Dies ist anders bei der Beschreibung der Relativbewegung einer Schwerionenreaktion. Dort erhält man innerhalb der ATDHF-Theorie  $Q \propto H_{ph}$  (s. Gl. (2.28)). Hier aber muß  $Q(\alpha)$  durch ein selbstkonsistentes Iterationsverfahren im Rahmen der Linear Response Theorie gelöst werden. Die

Gl. (2.52c) ist eine Linear Response Gleichung mit der Randbedingung (2.52a). Der Iterationsverfahren wird in Kapitel 3.4 behandelt; die zugehörigen numerischen Methoden befinden sich in 4.3.

Die Gl. (2.52c) kann umgeformt werden in:

$$\langle \phi(\alpha) | [ [ [H, Q(\alpha)] + \frac{\hbar i}{\theta_x} J^X ], Q(\alpha) ] | \phi(\alpha) \rangle = 0 \quad (2.53)$$

Mit der Normierungsbedingung (2.52a) erhält man dann:

$$\langle \phi(\alpha) | [ [H, Q(\alpha)], Q(\alpha) ] | \phi(\alpha) \rangle = - \frac{\hbar^2}{\theta_x} \quad (2.54)$$

Es ist zweckmäßig, einen Operator  $R(\alpha)$  einzuführen mit

$$R(\alpha) = \theta_x Q(\alpha) \quad (2.55)$$

Dann erhält man aus (2.54):

$$\langle \phi(\alpha) | [ [H, R(\alpha)], R(\alpha) ] | \phi(\alpha) \rangle = -\hbar^2 \theta_x \quad (2.56)$$

Die Linear Response Gleichung (2.52c) kann zur Bestimmung von  $R(\alpha)$  umgeformt werden:

$$[H, R(\alpha)]_{ph} | \phi(\alpha) \rangle = -\hbar i J^X | \phi(\alpha) \rangle \quad (2.57)$$

Die Gl. (2.57) ist der Ausgangspunkt für die iterative Bestimmung von  $R(\alpha)$ .

$R(\alpha)$  ist der zugehörige Linear Response Operator zu  $J^X$ . Mit  $R(\alpha)$  kann dann in Gl. (2.56) das Trägheitsmoment  $\theta_x$  bestimmt werden.

Allgemein gilt, daß für eine beliebige Bewegung  $P_q|\phi_q\rangle$  des nuklearen Systems der zugehörige Massenparameter bestimmt werden kann, wenn zuvor der entsprechende Linear Response Operator zu  $P$  bestimmt wurde.

Die Linear Response Gleichung (2.57) lautet dann:

$$[H, R(q)]_{ph}|\phi_q\rangle = -\hbar i P(q)|\phi_q\rangle \quad (2.58)$$

Der zugehörige Massenparameter  $M_{(q)}^{ATDHF}$  ist gegeben durch

$$\langle\phi_q|[[H, R(q)], R(q)]|\phi_q\rangle = -\hbar^2 M_{(q)}^{ATDHF} \quad (2.59)$$

Diese Gleichung entspricht, unter Berücksichtigung von  $R(q) = M_{(q)}^{ATDHF} Q(q)$ , genau der Gl. (2.25) für die ATDHF Masse der Relativbewegung. Der Unterschied besteht darin, daß der Operator  $Q(q)$  der Relativbewegung nicht iterativ berechnet werden muß, sondern durch die ATDHF-Gleichungen als Nebenprodukt abfällt. Dies bedeutet, daß ATDHF und Linear Response Massen äquivalent sind. Wir werden in Anhang A2 zeigen, daß die Linear Response Masse der Thouless-Vallatin Masse entspricht.

Damit eröffnet die iterative Bestimmung des Linear Response Operators  $R$  die Möglichkeit, asymptotisch korrekte Trägheitsmomente und Translationsmassen zu bestimmen. Diese Möglichkeit besteht sowohl für den ATDHF-Pfad als auch für den Gradienten-Pfad. Zum Beispiel bestimmt der Linear Response Operator zu

$$P(q)|\phi_q\rangle = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)_{ph}|\phi_q\rangle \quad (2.60)$$

die Translationsmasse in  $z$ -Richtung.



Das Linear Response Verfahren ermöglicht es, die kollektive Masse der Relativbewegung entlang des Gradienten-Pfades in Thouless-Valatin Näherung zu berechnen. Für den ATDHF-Pfad stellt die Linear Response Methode eine zweite Möglichkeit zur Berechnung der kollektiven Masse der Relativbewegung dar. Wir werden bei der  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  Reaktion sehen, daß diese zweite Möglichkeit numerisch günstiger ist. Die Massenparameter, die mit diesen Verfahren (ATDHF und Linear Response) berechnet werden, bezeichnen wir einheitlich als ATDHF Massen.

### 3. Formulierung der Theorie mit Skyrme-Kräften

#### 3.1 Die Skyrme Wechselwirkung

Die Skyrme-Wechselwirkung ist eine phänomenologische effektive Nukleon-Nukleon Wechselwirkung, die für niedrige Relativimpulse gültig ist. In ihrer ursprünglichen Form besteht sie aus einem Zweiteilchenpotential  $v_{ij}$  und einem Dreiteilchenpotential  $v_{ijk}$ <sup>15,28</sup>):

$$V = \sum_i \sum_j v_{ij}^{(2)} + \sum_i \sum_j \sum_k v_{ijk}^{(3)} \quad (3.1)$$

In der Ortsraumdarstellung gilt:

$$\begin{aligned} v_{12}^{(2)} = & t_0 (1 + \chi_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \frac{1}{2} t_1 [\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) K^2 + K'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] \\ & + t_2 \vec{K}' \cdot \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{K} + i W_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{K}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \vec{K} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Dabei ist  $P_\sigma$  der Spinaustauschoperator

$$P_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (3.3)$$

und  $\vec{K}, \vec{K}'$  sind die Operatoren des Relativimpulses

$$\begin{aligned} \vec{K} &= (\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2i \quad (\text{wirkt nach rechts}) \\ \vec{K}' &= -(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2i \quad (\text{wirkt nach links}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Für das Dreiteilchenpotential gilt:

$$v_{123}^{(3)} = t_3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \quad (3.5)$$

Für Hartree-Fock Rechnungen von spin-gesättigten gerade-gerade Kernen ist das Dreiteilchenpotential (3.5) äquivalent zu einem dichteabhängigen Zweiteilchenpotential:

$$v_{12}^{(2)} = \frac{1}{6} t_3 (1 + p_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho\left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right) \quad (3.6)$$

Die Darstellung (3.6) ist vorteilhafter als die Darstellung (3.5), da, wie wir wissen, die Dreiteilchenwechselwirkung in Kernen nur eine geringe Rolle spielt. Der dichteabhängige Anteil kann verallgemeinert werden zu:

$$v_{12}^{(2)} = \frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 p_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha\left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right) \quad (3.7)$$

In Hartree-Fock Rechnungen wird der Grundzustand eines Kerns durch eine Slaterdeterminante  $\phi$  von Einteilchenwellenfunktionen  $\alpha_i(\vec{r}, \sigma, q)$  beschrieben. Der Erwartungswert der Gesamtenergie ist gegeben durch:

$$E = \langle \phi | T + V | \phi \rangle = \sum_i \langle i | \frac{p^2}{2m} | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | \bar{v}_{12} | ij \rangle + \frac{1}{6} \sum_{ijk} \langle ijk | \bar{v}_{123} | ijk \rangle \quad (3.8)$$

Dabei sind  $\bar{v}_{12}$  und  $\bar{v}_{123}$  antisymmetrisierte Matrizen.

Wir beschränken uns auf die Berechnung von spin-gesättigten und ladungskonjugierten ( $\rho_p = \rho_n = \frac{1}{2} \rho$ ) Systemen unter Vernachlässigung der Spin-Bahn Wechselwirkung. Dann gilt:

$$E = \sum_i \langle i | \frac{p^2}{2m} | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | \bar{v}_{12} | ij \rangle \quad (3.9)$$

mit

$$\begin{aligned}
 v_{12} = & t_0(1+x_0 p_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \frac{1}{2} t_1 [\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) K^2 + K'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] \\
 & + t_2 \vec{K}' \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{K} + \frac{1}{6} t_3 (1+x_3 p_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right)
 \end{aligned} \quad (3.10)$$

Zu der Energie (3.9) wird noch der direkte Anteil eines Coulombpotentials addiert. Die Grundzustandsdichte (3.9) läßt sich als Integral über eine Hamiltondichte  $H(\vec{r})$  schreiben:

$$E = \int d^3r H(\vec{r}) \quad (3.11)$$

Mit der Bestimmung von  $H(\vec{r})$  ist dann  $E$  bekannt. Die Formulierung der statischen Hartree-Fock-Theorie findet man bei Vautherin und Brink<sup>39)</sup>, die Formulierung der ATDHF-Theorie wurde von Engel et al.<sup>40)</sup> durchgeführt. Zur Berechnung von  $H(\vec{r})$  benötigen wir verschiedene lokale Dichten.

Die Teilchendichte ist definiert als

$$\rho_q(\vec{r}_\sigma, \vec{r}'_\sigma) = \sum_K \alpha_K(\vec{r}_\sigma q) \alpha_K^*(\vec{r}'_\sigma q) \quad (3.12)$$

Wie aus dem Verhalten von  $\rho_q$  unter Zeitumkehr gezeigt werden kann, läßt sich die Teilchendichte als Summe eines skalaren und eines vektoriellen Teils darstellen:

$$\rho_q(\vec{r}_\sigma, \vec{r}'_\sigma) = \frac{1}{2} [\rho_q(\vec{r}, \vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'} + \sum_v \langle \sigma | \sigma_v | \sigma' \rangle S_v(\vec{r}, \vec{r}')] \quad (3.13)$$

mit

$$\rho_q(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{\sigma} \rho_q(\vec{r}_{\sigma}, \vec{r}'_{\sigma}) \quad (3.14)$$

$$\vec{S}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{\sigma\sigma'} \rho_q(\vec{r}_{\sigma}, \vec{r}'_{\sigma'}) \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle \quad (3.15)$$

Bei spingesättigten Systemen ist jedoch die Spindichte  $\vec{S}(\vec{r}, \vec{r}') = \vec{0}$ , so daß gilt (s. Anhang B):

$$\frac{1}{2} \rho_q(\vec{r}, \vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'} = \rho_q(\vec{r}_{\sigma}, \vec{r}'_{\sigma'}) \quad (3.16)$$

Insgesamt werden dann für die Berechnung von  $H(\vec{r})$  folgende lokale Dichten benötigt:

Die Teilchendichte:

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r}) \quad (3.17)$$

die Dichte der kinetischen Energie

$$\rho(\vec{r}) = [\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}' \rho(\vec{r}, \vec{r}')]_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (3.18)$$

und die Impulsdichte

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2i} [(\vec{\nabla} - \vec{\nabla}') \rho(\vec{r}, \vec{r}')]_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (3.19)$$

Durch Einsetzen der dichteabhängigen Zweiteilchenwechselwirkung (3.10) in (3.9) erhält man nach einigen Umformungen die Hamiltondichte  $H(\vec{r})$ :

$$\begin{aligned}
 H(\vec{r}) = & \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\vec{r}) + \frac{3}{8} t_0 \rho^2(\vec{r}) + \frac{(3t_1 + 5t_2)}{16} (\rho(\vec{r}) \tau(\vec{r}) - \vec{j}^2(\vec{r})) \\
 & - \frac{(9t_1 - 5t_2)}{64} \rho(\vec{r}) \nabla_\rho^2(\vec{r}) + \frac{1}{16} t_3 \rho^{(2+\alpha)}(\vec{r}) + H_c(\vec{r})
 \end{aligned}
 \tag{3.20}$$

In (3.20) ist der direkte Coulombterm  $H_c(\vec{r})$  hinzugefügt worden. Die Skyrme-Parameter  $x_0$  und  $x_3$  fallen heraus wegen Ladungskonjugation und Spinsättigung. Damit ist die Hamiltondichte durch die fünf Parameter  $t_0$ ,  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$  und  $\alpha$  eindeutig festgelegt.

Wir benutzen für unsere Berechnungen die Skyrme-Parametrisierungen SKII, SKIII, SKa und SKM\*. SKII und SKIII sind die bekannten Wechselwirkungen von Beiner et al.<sup>41)</sup>. Die Kraft SKa wurde von Köhler<sup>42)</sup> an die Oberflächenparameter der Massenformel von Myers und Swiatecki<sup>43)</sup> angefügt. Die Parametrisierung SKM\* wurde von Bartel et al.<sup>44)</sup> an die Tröpfchenmodellspaltungsbarriere von  $^{240}\text{Pu}$  angefügt. Das heißt, die Wechselwirkungen SKa und SKM\* berücksichtigen die Oberflächeneigenschaften der Kerne. Die Parameter und das Verhältnis  $m^*/m$  für die verschiedenen Skyrme-Kräfte sind in Tabelle 1 dargestellt.

Tabelle 1: Parameter der Skyrme-Wechselwirkungen und das Verhältnis  $m^*/m$

	SKII	SKIII	SKa	SKV	SKM*
$\alpha$	1.0	1.0	1/3	1.0	1/6
$t_0$ [MeVfm <sup>3</sup> ]	-1169.9	-1128.75	-1602.78	-1248.29	-2645.0
$t_1$ [MeVfm <sup>5</sup> ]	586.6	395.0	570.88	970.56	410.0
$t_2$ [MeVfm <sup>5</sup> ]	-27.1	-95.0	- 67.70	107.22	-135.0
$t_3$ [MeVfm <sup>6</sup> ]	9331.1	14000.0	8000.0	0.0	15595.0
$m^*/m$	0.58	0.76	0.61	0.38	0.79

### 3.2 Der kollektive Pfad

Nach dem Thouless-Theorem können die Gl. (2.6) und (2.29) für den Gradienten-Pfad bzw. ATDHF-Pfad durch die reellen Einteilchenwellenfunktionen ausgedrückt werden. Weiterhin kann der Kommutator in (2.29) durch den Hartree-Fock Operator  $W_0$  und durch den Linear Response Operator  $W_1$  ersetzt werden. Dann erhalten wir für den Gradienten-Pfad:

$$|\alpha, n+1\rangle = (1 - \epsilon(1 - \rho_0)W_0) |\alpha, n\rangle \quad (3.21)$$

und für den ATDHF-Pfad:

$$|\alpha, n+1\rangle = \{1 - \epsilon(1 - \rho_0)\} W_0 (1 - 2\rho_0) W_0 + W_1 \} |\alpha, n\rangle \quad (3.22)$$

dabei ist der Hartree-Fock Hamiltonoperator  $W_0$  gegeben durch

$$W_0 = T + \text{Tr}(v\rho_0) \quad (3.23)$$

und der Linear Response Operator  $W_1$  lautet:

$$W_1 = \text{Tr}\{v\rho_1\} \quad (3.24)$$

mit

$$\rho_1 = [W_0, \rho_0] \quad (3.25)$$

Die Bestimmung des Hartree-Fock Hamiltonoperators  $W = W_0 + W_1$  hängt entscheidend von der benutzten Wechselwirkung ab. Im folgenden Abschnitt 3.2.1 wird daher die explizite Berechnung von  $W$  für Skyrme-Kräfte durchgeführt. Diese Bestim-

mung von  $W = T + \text{Tr}(\rho v)$  erfolgt allgemein für eine nicht näher spezifizierte Einteilchendichte  $\rho$ . Im nächsten Abschnitt 3.2.2 werden wir daher die adiabatische Näherung berücksichtigen, d.h.  $\rho$  aufspalten in den zeitgeraden Anteil  $\rho_0$  und in den zeit-ungeraden Anteil  $\rho_1$  und die jeweils entsprechenden Operatoren  $W_0$  und  $W_1$  festlegen. Damit können wir dann den kollektiven Gradienten-Pfad und den kollektiven ATDHF-Pfad bestimmen.

### 3.2.1 Der Hartree-Fock-Hamiltonoperator

Der Hartree-Fock-Hamiltonoperator wird aus Gl. (3.11) durch Variation der Energie bestimmt

$$\delta \left\{ E - \sum_{i\sigma q} e^i \int d^3r \alpha_i(\vec{r}\sigma q) \alpha_i^*(\vec{r}\sigma q) \right\} = 0 \quad (3.26)$$

$$\delta E = \int d^3r \left\{ \left( \frac{\partial H}{\partial \tau} \right) (\vec{r}) \delta \tau(\vec{r}) + \left( \frac{\partial H}{\partial \rho} \right) (\vec{r}) \delta \rho(\vec{r}) + \left( \frac{\partial H}{\partial \vec{j}} \right) (\vec{r}) \cdot \delta \vec{j}(\vec{r}) \right\} \quad (3.27)$$

Aus (3.20) folgt dann

$$\left( \frac{\partial H}{\partial \tau} \right) (\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{(3t_1 + 5t_2)}{16} \rho(\vec{r}) \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial H}{\partial \rho} \right) (\vec{r}) = & \frac{3}{4} t_0 \rho(\vec{r}) + \frac{(3t_1 + 5t_2)}{16} \tau(\vec{r}) - \frac{(9t_1 - 5t_2)}{32} \nabla^2 \rho(\vec{r}) \\ & + \frac{(2+\alpha)}{16} t_3 \rho^{1+\alpha}(\vec{r}) + \frac{\partial H_c(\vec{r})}{\partial \rho} \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\left( \frac{\partial H}{\partial \vec{j}} \right) (\vec{r}) = - \frac{(3t_1 + 5t_2)}{8} \vec{j}(\vec{r}) \quad (3.30)$$



Die Variation der lokalen Dichten ergibt sich aus deren Definitionen (3.17)-(3.19). Es ist sinnvoll, die Dichten als Funktion der Einteilchenwellenfunktionen auszudrücken.

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r}) = \sum_{\sigma, q} \rho_q(\vec{r}\sigma, \vec{r}\sigma) = \sum_{i\sigma q} \alpha_i(\vec{r}\sigma q) \alpha_i^*(\vec{r}\sigma q) \quad (3.31)$$

$$\delta\rho(\vec{r}) = \sum_{i\sigma q} \{(\delta\alpha_i)(\vec{r}\sigma q) \alpha_i^*(\vec{r}\sigma q) + \alpha_i(\vec{r}\sigma q) (\delta\alpha_i^*)(\vec{r}\sigma q)\} \quad (3.32)$$

$$\tau(\vec{r}) = [\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}' \rho(\vec{r}, \vec{r}')]_{\vec{r}=\vec{r}'} = \sum_{i\sigma q} (\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}\sigma q) (\vec{\nabla}' \alpha_i^*)(\vec{r}'\sigma q)_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (3.33)$$

$$\delta\tau(\vec{r}) = \sum_{i\sigma q} \{(\delta\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}\sigma q) \cdot (\vec{\nabla} \alpha_i^*)(\vec{r}\sigma q) + (\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}\sigma q) (\delta\vec{\nabla} \alpha_i^*)(\vec{r}\sigma q)\} \quad (3.34)$$

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2i} [\vec{\nabla} - \vec{\nabla}'] \sum_{i\sigma q} \alpha_i(\vec{r}\sigma q) \alpha_i^*(\vec{r}'\sigma q)_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (3.35)$$

$$= \frac{1}{2i} \sum_{i\sigma q} \{(\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}\sigma q) \alpha_i^*(\vec{r}'\sigma q) - \alpha_i(\vec{r}\sigma q) (\vec{\nabla}' \alpha_i^*)(\vec{r}'\sigma q)\}_{\vec{r}=\vec{r}'}$$

$$\delta\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2i} \sum_{i\sigma q} \{(\delta\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}\sigma q) \alpha_i^*(\vec{r}\sigma q) + (\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}\sigma q) (\delta\alpha_i^*)(\vec{r}\sigma q) \quad (3.36)$$

$$- (\delta\alpha_i)(\vec{r}\sigma q) (\vec{\nabla} \alpha_i^*)(\vec{r}\sigma q) - \alpha_i(\vec{r}\sigma q) (\delta\vec{\nabla} \alpha_i^*)(\vec{r}\sigma q)\}$$

Durch Einsetzen von (3.28)-(3.30), (3.32), (3.34) und (3.36) in (3.27) erhält man nach partieller Integration:

$$\sum_{i\sigma q} \int d^3r \{ -\vec{\nabla} \frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) \vec{\nabla} + \frac{\partial H}{\partial \rho}(\vec{r}) - \frac{1}{2i} (\vec{\nabla} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) + \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}) - e_i \} \alpha_i^*(\vec{r}\sigma q)$$

$$\cdot \delta\alpha_i(\vec{r}\sigma q)$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{i\sigma q} \int d^3r \left\{ -\vec{\nabla} \frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) \vec{\nabla} + \frac{\partial H}{\partial \rho}(\vec{r}) + \frac{1}{2i} \left( \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) + \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \right) - e_i \right\} \alpha_i(\vec{r}\sigma q) \\
 & \cdot \delta \alpha_i^*(\vec{r}\sigma q) = 0
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Die Variationen der  $\alpha_i$  und  $\alpha_i^*$  sind unabhängig voneinander. Daraus folgt:

$$\left\{ -\vec{\nabla} \frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) \vec{\nabla} + \frac{\partial H}{\partial \rho}(\vec{r}) + \frac{1}{2i} \left( \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) + \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \right) \right\} \alpha_i(\vec{r}\sigma q) = e_i \alpha_i(\vec{r}\sigma q) \tag{3.38}$$

Aus (3.38) erhalten wir den Hartree-Fock-Hamiltonoperator:

$$W = -\vec{\nabla} \frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) \vec{\nabla} + \frac{\partial H}{\partial \rho}(\vec{r}) + \frac{1}{2i} \left( \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) + \frac{\partial H}{\partial \vec{j}}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \right) \tag{3.39}$$

### 3.2.2 Die adiabatische Näherung

Um die zeit-geraden und zeit-ungeraden Anteile<sup>6)</sup> des Hartree-Fock Operators aus (3.39) in adiabatischer Näherung zu bestimmen, muß man auf die Formulierung (2.18) der Slaterdeterminante in der quantisierten ATDHF-Theorie zurückgreifen. Anwenden des Thouless-Theorems auf (2.18) ergibt:

$$|\phi_{qp}\rangle = \left\{ 1 + ip \sum_{mi} (Q_{mi} a_m^\dagger a_i + Q_{mi}^* a_i^\dagger a_m) \right\} |\phi_q\rangle \tag{3.40}$$

Sei  $|\alpha_q^i\rangle$  ein Einteilchenzustand der Slaterdeterminante  $|\phi_q\rangle$  und sei  $|\alpha_{qp}^i\rangle$  ein Einteilchenzustand der Slaterdeterminante  $|\phi_{qp}\rangle$ . Dann gilt:

$$|\alpha_{qp}^i\rangle = \left\{ 1 + ip \sum_{mi} (Q_{mi} a_m^\dagger a_i + Q_{mi}^* a_i^\dagger a_m) \right\} |\alpha_q^i\rangle \tag{3.41}$$

Sei  $\rho_{qp}$  definiert als:

$$\rho_{qp} = \sum_i |\alpha_{qp}^i\rangle \langle \alpha_{qp}^i| \quad (3.42)$$

und sei

$$\rho_q = \sum_i |\alpha_q^i\rangle \langle \alpha_q^i| \quad (3.43)$$

Dann folgt aus (3.41):

$$\rho_{qp} = \rho_q + ip[Q, \rho_q] \quad (3.44)$$

$\rho_{qp}$  ist dabei die Gesamtdichte  $\rho$ ,  $\rho_q$  ist der zeit-gerade Anteil der Gesamtdichte, den wir mit  $\rho_0$  bezeichnen, und  $ip[Q, \rho_q]$  ist der zeit-ungerade Anteil der Dichte. Nach (2.28) können wir  $Q = (\partial V / \partial q)^{-1} (W_0)_{ph}$  setzen. Dann gilt mit  $p = M(q)\dot{q}$ :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_0(\vec{r}) + i\dot{q} M(q) (\partial V / \partial q)^{-1} [(W_0)_{ph}, \rho_0] \quad (3.45)$$

Für die Berechnung des kollektiven ATDHF-Pfades benötigen wir die Dichte  $\rho_1 = [W_0, \rho_0]$ . Der unterschiedliche Vorfaktor ist bereits in c(q) Gl. (2.27) berücksichtigt.

Wir verwenden für unsere Rechnungen reelle Einteilchenwellenfunktionen (siehe auch Kapitel 4. Numerische Methoden). Damit läßt sich dann  $\rho_1(\vec{r})$  vereinfachen. Es gilt:

$$\begin{aligned}\rho_1(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | [W_0, \rho_0] | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r} | W_0 \rho_0 - \rho_0 W_0 | \vec{r} \rangle \\ &= \sum_{i\sigma q} \langle \vec{r} \sigma q | W_0 | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \vec{r} \sigma q \rangle - \langle \vec{r} \sigma q | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | W_0 | \vec{r} \sigma q \rangle\end{aligned}\quad (3.46)$$

Bei reellen Einteilchenwellenfunktionen folgt daraus

$$\rho_1(\vec{r}) = 0 \quad (3.47)$$

Aber es gilt weiterhin:

$$\rho_1(\vec{r}, \vec{r}') \neq 0 \quad \text{für} \quad \vec{r} \neq \vec{r}' \quad (3.48)$$

Ebenso kann man die Dichte der kinetischen Energie  $\tau(\vec{r})$  und die Impulsdichte für reelle Einteilchenwellenfunktionen vereinfachen. Dann gilt:

$$\tau(\vec{r}) = \sum_{i\sigma q} \langle \vec{r} \sigma q | \vec{\nabla} \alpha^i \rangle^2 \quad (3.49)$$

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2i} [(\vec{\nabla} - \vec{\nabla}') \rho_1(\vec{r}, \vec{r}')]_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (3.50)$$

Bei spinabgesättigten Kernen besteht in adiabatischer Näherung der zeit-gerade Anteil  $W_+$  des Einteilchen-Hamiltonoperators  $W$  (3.39) aus den Anteilen von  $W$ , die zu  $\rho_0$  gehören, und der zeit-ungerade Teil  $W_-$  besteht aus den Anteilen, die zu  $\rho_1$  gehören. Wir erhalten dann:

$$W_0 = -\vec{\nabla} \frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) \vec{\nabla} + \frac{\partial H}{\partial \rho}(\vec{r}) \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{(3t_1 + 5t_2)}{16} \rho_0(\vec{r}) \quad (3.52)$$

Sei  $\rho_{qp}$  definiert als:

$$\rho_{qp} = \sum_i |\alpha_{qp}^i\rangle \langle \alpha_{qp}^i| \quad (3.42)$$

und sei

$$\rho_q = \sum_i |\alpha_q^i\rangle \langle \alpha_q^i| \quad (3.43)$$

Dann folgt aus (3.41):

$$\rho_{qp} = \rho_q + ip[Q, \rho_q] \quad (3.44)$$

$\rho_{qp}$  ist dabei die Gesamtdichte  $\rho$ ,  $\rho_q$  ist der zeit-gerade Anteil der Gesamtdichte, den wir mit  $\rho_o$  bezeichnen, und  $ip[Q, \rho_q]$  ist der zeit-ungerade Anteil der Dichte. Nach (2.28) können wir  $Q = (\partial V / \partial q)^{-1} (W_o)_{ph}$  setzen. Dann gilt mit  $p = M(q)\dot{q}$ :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_o(\vec{r}) + i\dot{q} M(q) (\partial V / \partial q)^{-1} [(W_o)_{ph}, \rho_o] \quad (3.45)$$

Für die Berechnung des kollektiven ATDHF-Pfades benötigen wir die Dichte  $\rho_1 = [W_o, \rho_o]$ . Der unterschiedliche Vorfaktor ist bereits in  $c(q)$  Gl. (2.27) berücksichtigt.

Wir verwenden für unsere Rechnungen reelle Einteilchenwellenfunktionen (siehe auch Kapitel 4. Numerische Methoden). Damit läßt sich dann  $\rho_1(\vec{r})$  vereinfachen. Es gilt:

$$\begin{aligned}\rho_1(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | [W_0, \rho_0] | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r} | W_0 \rho_0 - \rho_0 W_0 | \vec{r} \rangle \\ &= \sum_{i\sigma q} \langle \vec{r} \sigma q | W_0 | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | \vec{r} \sigma q \rangle - \langle \vec{r} \sigma q | \alpha^i \rangle \langle \alpha^i | W_0 | \vec{r} \sigma q \rangle\end{aligned}\quad (3.46)$$

Bei reellen Einteilchenwellenfunktionen folgt daraus

$$\rho_1(\vec{r}) = 0 \quad (3.47)$$

Aber es gilt weiterhin:

$$\rho_1(\vec{r}, \vec{r}') \neq 0 \quad \text{für} \quad \vec{r} \neq \vec{r}' \quad (3.48)$$

Ebenso kann man die Dichte der kinetischen Energie  $\tau(\vec{r})$  und die Impulsdichte für reelle Einteilchenwellenfunktionen vereinfachen. Dann gilt:

$$\tau(\vec{r}) = \sum_{i\sigma q} \langle \vec{r} \sigma q | \vec{\nabla} \alpha^i \rangle^2 \quad (3.49)$$

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2i} [(\vec{\nabla} - \vec{\nabla}') \rho_1(\vec{r}, \vec{r}')]_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (3.50)$$

Bei spinabgesättigten Kernen besteht in adiabatischer Näherung der zeit-gerade Anteil  $W_+$  des Einteilchen-Hamiltonoperators  $W$  (3.39) aus den Anteilen von  $W$ , die zu  $\rho_0$  gehören, und der zeit-ungerade Teil  $W_-$  besteht aus den Anteilen, die zu  $\rho_1$  gehören. Wir erhalten dann:

$$W_0 = -\vec{\nabla} \frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) \vec{\nabla} + \frac{\partial H}{\partial \rho}(\vec{r}) \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \tau}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{(3t_1 + 5t_2)}{16} \rho_0(\vec{r}) \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial H}{\partial \rho}(\vec{r}) &= \frac{3}{4} t_0 \rho_0(\vec{r}) + \frac{(3t_1+5t_2)}{16} \tau(\vec{r}) \\
 &- \frac{(9t_1-5t_2)}{32} \nabla^2 \rho(\vec{r}) + \frac{(2+\alpha)}{16} t_3 \rho_0^{1+\alpha}(\vec{r}) \\
 &+ \frac{1}{4} e^2 \int d^3 r' \frac{\rho_0(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

und

$$w_1 = \frac{(3t_1+5t_2)}{32} (\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_1(\vec{r}) + \vec{j}_1(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}) \tag{3.54}$$

Wir verwenden Quartettssymmetrie für die Einteilchenwellenfunktionen (siehe Kapitel 4. Numerische Methoden). Damit gilt:

$$\rho_0(\vec{r}) = 4 \sum_i \alpha_i^2(\vec{r}) \tag{3.55}$$

$$\tau(\vec{r}) = 4 \sum_i (\vec{\nabla} \alpha_i)^2(\vec{r}) \tag{3.56}$$

$$\begin{aligned}
 \vec{j}_1(\vec{r}) &= 4 \sum_i \{ (\vec{\nabla}(w_0)_{ph \alpha_i})(\vec{r}) \alpha_i(\vec{r}) - (\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}) ((w_0)_{ph \alpha_i})(\vec{r}) \\
 &- ((w_0)_{ph \alpha_i})(\vec{r}) (\vec{\nabla} \alpha_i)(\vec{r}) + \alpha_i(\vec{r}) (\vec{\nabla}(w_0)_{ph \alpha_i})(\vec{r}) \}
 \end{aligned} \tag{3.57}$$

### 3.3 Die Hartree-Fock Energie

Die Hartree-Fock Energie (2.11) bzw. (2.24) wird entlang des kollektiven Gradienten- und ATDHF-Pfades berechnet. Wir bezeichnen hier  $V(q)$  aus (2.11) bzw. (2.24) mit  $E^{HF}$ :

$$E^{HF} \equiv V \quad (3.58)$$

In der Einteilchen-Hartree-Fock Basis  $\{\alpha_i\}$ , in der die Einteilchendichte  $\rho$  diagonal ist, gilt:

$$E^{HF} = \sum_{i=1}^A t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A V_{ij,ij} \quad (3.59)$$

Nach elementaren Umformungen (siehe z.B. Ring, Schuck<sup>15</sup>) erhält man

$$E^{HF} = \frac{1}{2} \sum_i (e_i + t_{ii}) - \frac{1}{2} \sum_i \langle \phi | \frac{\partial V}{\partial \rho_{ii}} | \phi \rangle \quad (3.60)$$

Dabei ist  $e_i$  der Erwartungswert von  $W_0$  (3.51) im Einteilchenzustand  $\alpha_i$ ,  $t_{ii}$  sind die Diagonalelemente des Operators der kinetischen Energie und  $V$  ist die Skyrme-Wechselwirkung (3.10) bzw. (3.7). Der Zusatzterm in Gl. (3.60), die sog. Rearrangement Energie, tritt nur bei dichteabhängigen Wechselwirkungen auf. Für die Skyrme-Wechselwirkung erhalten wir:

$$E^{HF} = \frac{1}{2} \sum_i (e_i + t_{ii}) - \frac{t_{3\alpha}}{32} \int d^3r \rho^{2+\alpha}(\vec{r}) \quad (3.61)$$



### 3.4 Die Massenparameter

Bei der Berechnung der ATDHF-Massenparameter nach dem Linear Response Verfahren geht man aus von der Linear Response Gl. (2.58)<sup>45</sup>):

$$[H, R(q)]_{ph} |\phi_q\rangle = -i\hbar P(q) |\phi_q\rangle \quad (3.62)$$

Es ist das Ziel des Linear Response Verfahrens, für einen zeit-ungeraden 1 Teilchen-1 Loch und 1 Loch-1 Teilchen Operator P einen zeit-geraden 1 Teilchen-1 Loch und 1 Loch-1 Teilchen Operator R zu finden, der Gl. (3.62) erfüllt.

Die Berechnung der Linear Response Massen kann für jedes  $|\phi_q\rangle$  durchgeführt werden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit lassen wir im folgenden den Index q weg. Die Massenparameter hängen aber selbstverständlich von q ab.

Der Kommutator in (3.62) kann umgeformt werden zu:

$$[H, R] |\phi\rangle = \{[W_0, R] + W_R\} |\phi\rangle \quad (3.63)$$

Dabei ist  $W_0$  der Hartree-Fock Hamiltonoperator und  $W_R$  ist gegeben durch:

$$W_R = \text{Tr}\{[R, \rho_0] v\} \quad (3.64)$$

$v$  ist die Zweiteilchenwechselwirkung. In unserem Fall ist es die Skyrme-Wechselwirkung (3.10). Die Linear Response Gl. wird durch Iteration gelöst:

$$R^{(n+1)} |\phi\rangle = R^{(n)} |\phi\rangle - \epsilon \{[H, R^{(n)}]_{ph} + i\hbar P\} |\phi\rangle \quad (3.65)$$

Es empfiehlt sich, als Startoperator für die Iteration

$$R^{(0)}|\phi\rangle = -i\hbar P|\phi\rangle \quad (3.66)$$

zu wählen. Das Iterationsverfahren ist beendet, wenn  $R^{(n+1)}|\phi\rangle = R^{(n)}|\phi\rangle$ . Das bedeutet, daß  $R^{(n)}$  die Gl. (3.62) erfüllt und daß  $R^{(n)}$  der Linear Response Operator zu  $P$  ist. Die zugehörige ATDHF-Masse erhält man dann durch Einsetzen von  $R^{(n)}$  in (2.59):

$$-\hbar^2 M^{\text{ATDHF}} = \langle\phi|[[H, R^{(n)}], R^{(n)}]|\phi\rangle \quad (3.67)$$

Die entsprechenden GCM-Massenparameter können berechnet werden durch Einsetzen der Operatoren  $P$  in Gl. (2.9). Um das numerische Verfahren zu vereinheitlichen, werden die Antikommutatoren in (2.9) zu Kommutatoren umgeformt. Dies geschieht durch Einführen des Operators  $\tilde{Q}$ , der lokal redundant zu  $P$  ist<sup>20</sup>):

$$\tilde{Q}|\phi\rangle = -i P|\phi\rangle \quad (3.68a)$$

$$\langle\phi|\tilde{Q} = i\langle\phi|P \quad (3.68b)$$

Damit lautet (2.9):

$$M_{\text{GCM}}^{-1} = \frac{\langle\phi|[\tilde{Q}, [H, \tilde{Q}]]|\phi\rangle}{4\langle\phi|\tilde{Q}^2|\phi\rangle} \quad (3.69)$$

Der Doppelkommutator ergibt:

$$\langle\phi|[\tilde{Q}, [H, \tilde{Q}]]|\phi\rangle = \langle\phi|[\tilde{Q}, [W_0, \tilde{Q}]]|\phi\rangle + \langle\phi|[\tilde{Q}, W_{\tilde{Q}}]|\phi\rangle \quad (3.70)$$

$W_{\tilde{Q}}$  ist analog zu (3.64) gegeben:

$$W_{\tilde{Q}} = \text{Tr}\{[\tilde{Q}, \rho_0]v\}. \quad (3.71)$$

Der zweite Term in (3.70) kann weiter umgeformt werden:

$$\langle \phi | [\tilde{Q}, W_{\tilde{Q}}] | \phi \rangle = \text{Tr}\{\text{Tr}\{[\tilde{Q}, \rho_0]v\}[\tilde{Q}, \rho_0]\} \quad (3.72)$$

Für die Skyrme-Wechselwirkung erhält man (s. Anhang A.3)<sup>46)</sup>:

$$\text{Tr}\{\text{Tr}\{[\tilde{Q}, \rho_0]v\}[\tilde{Q}, \rho_p]\} = - \frac{(3t_1 + 5t_2)}{32} \int d^3r \tilde{j}_{\tilde{Q}}^2(\vec{r}) \quad (3.73)$$

mit

$$\tilde{j}_{\tilde{Q}}(\vec{r}) = [(\vec{\nabla} - \vec{\nabla}') \rho_{\tilde{Q}}(\vec{r}, \vec{r}')]_{\vec{r}=\vec{r}'} \quad (3.74)$$

Die Dichte  $\rho_{\tilde{Q}}$  ist gegeben durch:

$$\rho_{\tilde{Q}} = \sum_{i=1}^A \tilde{Q} |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| - |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| \tilde{Q} \quad (3.75)$$

Dies ist eine Verallgemeinerung der Dichte  $\rho_1$  (3.46) und des Impulsstromes  $\tilde{j}(\vec{r})$  (3.57) für einen allgemeinen zeit-geraden 1 Teilchen-1 Loch und 1 Loch-1 Teilchen Operator  $\tilde{Q}$ . Der endgültige Ausdruck für den GCM-Massenparameter, berechnet mit Skyrme-Wechselwirkungen, lautet dann:

$$M_{\text{GCM}}^{-1} = \frac{\langle \phi | [\tilde{Q}, [W_0, \tilde{Q}]] | \phi \rangle - \frac{(3t_1 + 5t_2)}{32} \int d^3r \tilde{j}_{\tilde{Q}}^2(\vec{r})}{4 \langle \phi | \tilde{Q}^2 | \phi \rangle} \quad (3.76)$$

#### 4. Numerische Methoden

##### 4.1 Allgemeines

Für die numerischen Rechnungen werden die Slaterdeterminanten  $|\phi_q\rangle$  durch die Menge der besetzten Einteilchenzustände  $\{|\alpha_{a,n}\rangle, a=1, \dots, A\}$  ausgedrückt. Die Einteilchenzustände werden auf einem dreidimensionalen Gitter im Orts- und Impulsraum dargestellt:

$$\alpha_a(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \alpha_a \rangle \quad (4.1a)$$

$$\alpha_a(\vec{k}) = \langle \vec{k} | \alpha_a \rangle \quad (4.1b)$$

Ein Einteilchenoperator  $S$  wird beschrieben durch seine Anwendung auf die Zustände  $|\alpha_{a,n}\rangle$ . Die Zustände  $|S\alpha_{a,n}\rangle$  werden dann ebenfalls auf dem dreidimensionalen Orts- und Impulsraumgitter dargestellt:

$$(S\alpha_{a,n})(\vec{r}) = \langle \vec{r} | S | \alpha_{a,n} \rangle \quad (4.2a)$$

$$(S\alpha_{a,n})(\vec{k}) = \langle \vec{k} | S | \alpha_{a,n} \rangle \quad (4.2b)$$

Für die Wellenfunktionen setzen wir Quartett-Symmetrie voraus, d.h. Protonen und Neutronen werden in gleicher Weise behandelt unter der Annahme einer effektiven Ladung  $1/2 e$ . Wir benutzen Spiegelungssymmetrie bezüglich der x-z und der y-z Ebene. Das Ortsraumgitter besteht aus  $16 \times 16 \times 32$  Gitterpunkten. Der Abstand  $\Delta$  zwischen den einzelnen Gitterpunkten mußte jeweils entsprechend der gewünschten Rechengenauigkeit gewählt werden. Für die Berechnung von  $^{12}\text{C} + ^{20}\text{Ne}$  mit SKV und für die Berechnung von  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$  ergab ein  $\Delta$  von 1.0 fm zufriedenstellende Genauigkeit; für die Berechnung von  $^{12}\text{C} + ^{20}\text{Ne}$  mit SKIII war dagegen ein  $\Delta$  von 0.8 fm notwendig.

Die Transformation zwischen Orts- und Impulsraum wird mit der Fast-Fourier-Technik durchgeführt. Bei Wechselwirkungen vom Skyrme-Typ gelten Fourierkomponenten der Wellenfunktion mit einer Energie  $\hbar^2 k^2 / 2m$  größer als  $E_{\text{CUT}} = 100\text{--}200$  MeV nicht mehr als physikalisch. Wir können deshalb voraussetzen, daß alle Fourierkomponenten, die einer höheren Energie als  $E_{\text{CUT}}$  entsprechen, gleich Null sind. Das  $E_{\text{CUT}}$  wurde in Abhängigkeit vom Gitterabstand  $\Delta$  gewählt:

$$E_{\text{CUT}} = 100 \text{ MeV} \quad \text{für } \Delta = 1.0 \text{ fm}$$

$$E_{\text{CUT}} = 160 \text{ MeV} \quad \text{für } \Delta = 0.8 \text{ fm}$$

Die Wirkung des Impulsoperators auf eine Einteilchenwellenfunktion kann im Impulsraum durch eine einfache Multiplikation bestimmt werden. Die bei der Berechnung des kollektiven Gradienten-Pfades (2.6), (3.21) und des kollektiven ATDHF-Pfades (2.29), (3.22) auftretende Schrittweite  $\epsilon$  muß so gewählt werden, daß die Lösungen des Differentialgleichungssystems stabil sind. Diese Bedingung bestimmt eine kritische Schrittweite und verlangt:

$$\epsilon < \frac{2}{E_{\text{CUT}}} \quad (4.3a)$$

für den Gradientenpfad und

$$\epsilon < \frac{2}{E_{\text{CUT}} \cdot E_{\text{CUT}}} \quad (4.3b)$$

für den ATDHF-Pfad. Dies zeigt, daß die Iteration für den ATDHF-Pfad eine wesentlich kleinere Schrittweite verlangt als die Iteration für den Gradienten-Pfad. Da außerdem der Propagator des ATDHF-Pfades komplizierter ist als der des Gradienten-Pfades, wird für die Berechnung des ATDHF-Pfades eine viel län-

gere Rechenzeit benötigt. Für die ATDHF-Berechnungen von Schwerionensystemen mit mehr als 32 Nukleonen ist es aus Gründen der CPU-Zeit günstiger, das Computerprogramm zu vektorisieren und die Rechnungen auf einem Vektorrechner durchzuführen.

Da sich unter den gegebenen Paritätssymmetrien der Wellenfunktionen die Programme für die Fouriertransformationen zwischen Orts- und Impulsraum nur schwer vektorisieren lassen, werden die Rechnungen für das System  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  ausschließlich auf einem Ortsraumgitter durchgeführt. Es ist also nicht mehr möglich, Differentiationen durch einfache Multiplikationen im Impulsraum auszuführen; die Differentiationen werden deshalb im Ortsraum mittels Drei- und Fünfpunktformeln durchgeführt. Die Berechnung des kollektiven Pfades kann dann im wesentlichen wie in 4.2 erfolgen, mit Ausnahme der Fouriertransformationen. Die Berechnung der kollektiven Masse nach dem Linear Response Verfahren (s. 4.3) erfordert dagegen zusätzliche Modifikationen.

## 4.2 Die Berechnung des kollektiven Pfades

Die Gl. (3.21) bzw. (3.22) und (3.51) bis (3.57) bilden die Grundlage für die Berechnung der kollektiven Pfade. Die explizite Berechnung des kollektiven Pfades kann in die folgenden Schritte unterteilt werden:

- I) Bestimmen von  $(W_0 \alpha_a)(\vec{k})$
- 1a) Aus den gegebenen Einteilchenwellenfunktionen  $\langle \vec{k} | \alpha_a \rangle$  bestimmen wir durch Fouriertransformation die  $\langle \vec{r} | \alpha_a \rangle$  und benutzen diese zur Berechnung der Dichteverteilung  $\rho_0(\vec{r})$ .
- 1b) Die vorgegebenen  $\langle \vec{k} | \alpha_a \rangle$  werden im k-Raum mit  $\vec{k}^2$  multipliziert. Die Funktionen  $\vec{k}^2 \langle \vec{k} | \alpha_a \rangle$  werden Fourier-transformiert zu  $\Delta \langle \vec{r} | \alpha_a \rangle$  und diese werden benutzt, um  $\Delta \rho_0(\vec{r})$  zu bestimmen.
- 1c) Die  $\langle \vec{k} | \alpha_a \rangle$  werden im Impulsraum mit  $k_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) multipliziert; die resultierenden Funktionen werden dann Fourier-transformiert zu  $\frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{r} | \alpha_a \rangle$ . Mit diesen Funktionen wird dann  $\tau_0(\vec{r})$  bestimmt.

Mit  $\rho_0(\vec{r})$ ,  $\Delta \rho_0(\vec{r})$  und  $\tau_0(\vec{r})$  kann dann das Einteilchenpotential  $U(\vec{r}) = \partial H / \partial \rho$  (3.53) bestimmt werden. Durch Fouriertransformation erhält man  $\tilde{U}(\vec{k})$ .

- 2) Die Einteilchendichte  $\rho_0(\vec{r})$  und die Funktionen  $\frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{r} | \alpha_a \rangle$  ( $i = 1, 2, 3$ ) werden von (I.1) übernommen. Dann werden die folgenden Ausdrücke berechnet:

$$G_a^i(\vec{r}) = \left( \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{(3t_1 + 5t_2)}{16} \right) \rho_0(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_a(\vec{r})$$

Diese Funktionen  $G_a^i(\vec{r})$  werden dann Fourier-transformiert und mit  $k_i$  multipliziert:

$$G_a^i(\vec{r}) \longrightarrow \tilde{G}_a^i(\vec{k}) \longrightarrow k_i \tilde{G}_a^i(\vec{k})$$

Die Endresultate werden aufsummiert und wir erhalten:

$$(T\alpha_a)(\vec{k}) = \sum_{i=1,2,3} k_i \tilde{G}_a^i(\vec{k})$$

Mit den Ergebnissen aus (I.1) und (I.2) erhält man die Wirkung des Hartree-Fock Operators  $W_0$  auf eine Einteilchenwellenfunktion  $|\alpha_a\rangle$ . Die Schritte (I.1a) bis (I.1c) und (I.2) müssen für alle besetzten Einteilchenwellenfunktionen durchgeführt werden.

II. Bestimmen von  $(W_1\alpha_a)(\vec{k})$

II.1 Bestimmen von  $\vec{j}(\vec{r})$

II.1.1 Aus  $(W_0\alpha_a)(\vec{k}) = \langle \vec{k} | W_0 | \alpha_a \rangle$  bestimmen wir  $\langle \vec{k} | \rho_0 W_0 | \alpha_a \rangle$  durch Summation und Integration:

$$\langle \vec{k} | \rho_0 W_0 | \alpha_a \rangle = \sum_a \langle \vec{k} | \alpha_a \rangle \langle \alpha_a | \int d^3k' | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | W_0 | \alpha_a \rangle$$

$$\text{Daraus erhalten wir } \langle \vec{k} | (1-\rho_0) W_0 | \alpha_a \rangle = \langle \vec{k} | (W_0)_{ph} | \alpha_a \rangle$$

1.1a) Die Funktion  $\langle \vec{k} | (W_0)_{ph} | \alpha_a \rangle$  wird Fourier-transformiert und wir erhalten  $\langle \vec{r} | (W_0)_{ph} | \alpha_a \rangle$

1.1b) Die Funktion  $\langle \vec{k} | (W_0)_{ph} | \alpha_a \rangle$  wird mit  $k_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) multipliziert und anschließend Fourier-transformiert:

$$\tilde{H}_a^i(\vec{k}) = k_i \langle \vec{k} | (W_0)_{ph} | \alpha_a \rangle \longrightarrow H_a^i(\vec{r}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{r} | (W_0)_{ph} | \alpha_a \rangle$$



Die Schritte von Abschnitt (II.1.1) werden für alle besetzten Einteilchenwellenfunktionen  $|\alpha_a\rangle$  bestimmt. Dann erhält man die Komponenten von  $\vec{j}(\vec{r})$  wie folgt:

$$\text{II.1.2} \quad j_i(\vec{r}) = \sum_{a=1}^A \alpha_a(\vec{r}) H_a^i(\vec{r}) - \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \alpha_a(\vec{r}) \right) \langle \vec{r} | (W_0)_{ph} | \alpha_a \rangle$$

$$\text{II.2} \quad \text{Bestimmen von } (\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}) + \vec{j}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}) \alpha_a(\vec{r})$$

II.2a) Die gegebenen Einteilchenwellenfunktionen  $\langle \vec{r} | \alpha_a \rangle$  werden mit  $j_i(\vec{r})$  multipliziert; dann werden die Produkte Fourier-transformiert und mit  $k_i$  multipliziert ( $i = 1, 2, 3$ ):

$$F_a^i(\vec{r}) = j_i(\vec{r}) \alpha_a(\vec{r}) \longrightarrow \tilde{F}_a^i(\vec{k}) \longrightarrow k_i \tilde{F}_a^i(\vec{k})$$

Die Resultate werden aufsummiert:

$$\tilde{E}_a^1(\vec{k}) = \sum_{i=1,2,3} k_i \tilde{F}_a^i(\vec{k})$$

II.2b) Mit der Stromdichte  $j_i(\vec{r})$  aus (II.1.2) und mit den Funktionen  $\frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{r} | \alpha_a \rangle$  aus (I.1c) können wir den zweiten Anteil von  $(W_1 \alpha_a)(\vec{k})$  bestimmen:

$$E_a^2(\vec{r}) = \sum_{i=1,2,3} j_i(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \vec{r} | \alpha_a \rangle$$

Dieses wird Fourier-transformiert:  $E_a^2(\vec{r}) \longrightarrow \tilde{E}_a^2(\vec{k})$ . Damit ist die Wirkung des Operators  $W_1$  auf eine Einteilchenwellenfunktion dann gegeben durch:

$$(W_1 \alpha_a)(\vec{k}) = \frac{(3t_1 + 5t_2)}{32} [\tilde{E}_a^1(\vec{k}) + \tilde{E}_a^2(\vec{k})]$$

Mit  $(W_0 \alpha_a)(\vec{k})$  und  $(W_1 \alpha_a)(\vec{k})$  kann nun der kollektive Gradienten- und ATDHF-Pfad (3.21) bzw. (3.22) bestimmt werden. Weitere Einzelheiten befinden sich in Ref. 25.

### 4.3 Die Berechnung der ATDHF-Masse im Linear Response Verfahren

Die Iteration zur Lösung der Linear Response Gl. (3.65) kann durch die Einführung eines impulsabhängigen Dämpfungsfaktors  $\epsilon'(k)$  und durch die Berücksichtigung der Normstabilisierung  $N^{(n)}$  beschleunigt werden. Diese Faktoren lauten<sup>45)</sup>:

$$\epsilon'(k) = \frac{\delta}{\frac{k^2}{2m} + C} \quad (4.4)$$

$$N^{(n)} = \frac{\langle \phi_q | P^2 | \phi_q \rangle}{\langle \phi_q | P[H, R^{(n)}] | \phi_q \rangle} \quad (4.5)$$

In der Formulierung mit Einteilchenwellenfunktionen erhält man dann damit die Linear Response Gl.:

$$R^{(n+1)} | \alpha_a \rangle = N^{(n)} R^{(n)} | \alpha_a \rangle - \epsilon'(k) \{ N^{(n)} [H, R^{(n)}]_{ph} + i\hbar P \} | \alpha_a \rangle \quad (4.6)$$

Die energieabhängige Schrittweite  $\epsilon'(k)$  gleicht die unterschiedlichen Konvergenzgeschwindigkeiten der verschiedenen Einteilchenwellenfunktionen aus, so daß alle Komponenten mit nahezu gleicher Geschwindigkeit konvergieren<sup>47)</sup>. Die Parameter  $\delta$  und  $C$  müssen so bestimmt werden, daß eine schnelle und stabile Konvergenz ermöglicht wird. Dies hängt ab vom System und von der verwendeten Wechselwirkung. Die Parameter des Dämpfungsfaktors sind zusammen mit der Schrittweite und den Gitterparametern in Tabelle 2 und 3 aufgeführt.

Tabelle 2: Parameter für die Berechnung des ATDHF-Pfades

	$\epsilon$ [MeV <sup>-2</sup> ]	$E_{\text{CUT}}$ [MeV]	$\Delta$ [fm]	$\delta$ [MeV]	$C$ [MeV]
$^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , SKIII	$5 \cdot 10^{-5}$	160	0.8	1.6	30.
$^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , SKV	$5 \cdot 10^{-5}$	100	1.0	3.5	190.
$^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ , SKM*	$10^{-4}$	100	1.0	1.5	30.

Tabelle 3: Parameter für die Berechnung des Gradienten-Pfades

	$\epsilon$ [MeV <sup>-1</sup> ]	$E_{\text{CUT}}$ [MeV]	$\Delta$ [fm]	$\delta$ [MeV]	$C$ [MeV]
$^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , SKIII	$5 \cdot 10^{-3}$	160.	0.8	1.6	30.
$^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , SKV	$10^{-2}$	100.	1.0	0.9	30.
$^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ , SKM*	$10^{-3}$		1.0	0.01	20.

Für die Berechnung der verschiedenen ATDHF-Massen nach dem Linear Response Verfahren muß man die folgenden Startoperatoren  $P$  nehmen:

$$P = i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x} \right)_{\text{ph}} \quad (4.7a)$$

für  $M_x$ , die Translationsmasse in x-Richtung,

$$P = i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial z} \right)_{\text{ph}} \quad (4.7b)$$

für  $M_z$ , die Translationsmasse in z-Richtung und

$$P = i\hbar (\tilde{J}_x)_{ph} \quad (4.7c)$$

mit

$$\tilde{J}^x = y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \quad (4.7d)$$

für  $\theta_x$ , das Trägheitsmoment für Rotationen um die x-Achse.

Der jeweils zugehörige Massenparameter ist gegeben durch

$$M_x(q) = i \langle \phi_q | [i\hbar (\frac{\partial}{\partial x})_{ph}, R] | \phi_q \rangle \quad (4.8a)$$

$$M_z(q) = i \langle \phi_q | [i\hbar (\frac{\partial}{\partial z})_{ph}, R] | \phi_q \rangle \quad (4.8b)$$

$$\theta_x(q) = i \langle \phi_q | [i\hbar (\tilde{J}_x)_{ph}, R] | \phi_q \rangle \quad (4.8c)$$

Dabei ist R immer der jeweilige Linear Response Operator zu P, berechnet nach Gl. (4.6).

Für die Berechnung der kollektiven Massen der Relativbewegung, also der ATDHF-Masse, im Linear Response Verfahren nehmen wir als Startoperator:

$$P | \phi_q \rangle = i\hbar (\frac{\partial}{\partial q})_{ph} | \phi_q \rangle \quad (4.9)$$

Der Operator  $\partial/\partial q$  wird angenähert durch:

$$\frac{\partial}{\partial q} | \phi_q \rangle = \frac{| \phi_{q+\delta q} \rangle - | \phi_q \rangle}{\delta q} \quad (4.10)$$

Die Größe von  $\delta q$  beeinflusst beträchtlich die Genauigkeit der Resultate für die kollektive ATDHF-Masse. Um diesen Einfluß genau zu untersuchen, haben wir die ATDHF-Masse an verschiedenen Punkten des ATDHF-Pfades mit den beiden Methoden berechnet, nämlich mit der ATDHF-Methode und mit dem Linear Response Verfah-

ren, wobei wir (4.10) als Startoperator  $R^{(0)}$  genommen haben. Die Ergebnisse werden in Abb. 1 gezeigt. Die waagerechte Linie gibt den Wert der kollektiven Masse an, wie er mit der ATDHF-Methode erzielt wurde. Die iterierte ATDHF-Masse, die mit dem Linear Response Verfahren berechnet wurde, erreicht für kleine  $\delta q$  genau den Massenwert der ATDHF-Methode. Die Berechnung der ATDHF-Massen im Ortsraumcode erfordert zusätzlich Veränderungen, da der Dämpfungsterm (Gl. (4.4)) speziell an den Impulsraum angepaßt ist und für Ortsraumrechnungen nicht praktikabel ist<sup>47)</sup>. Anstatt (4.4) benutzen wir einen Dämpfungsfaktor  $\tilde{\epsilon}$ , gegeben durch:

$$\tilde{\epsilon}(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \frac{\delta}{\left| -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\psi}{\psi} \right| + C} \psi(\vec{x}) \quad (4.11)$$

#### 4.4 Numerische Genauigkeit

Die Genauigkeit der numerischen Rechnungen kann in der asymptotischen Gegend nachgeprüft werden. Die asymptotische Gegend ist definiert als der Bereich, in dem das Potential zwischen den beiden Fragmenten durch das Coulombpotential gegeben ist.

Im asymptotischen Bereich ist die kollektive Masse der Relativbewegung gleich der reduzierten Masse  $\mu$  des Schwerionensystems; die Translationsmassen in x-, y- und z-Richtung sind gleich der Gesamtmasse  $M$  des Systems. Für Systeme von zwei sphärischen Kernen, wie z.B.  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ , sollte darüber hinaus das Trägheitsmoment  $\theta_x$  in guter Näherung durch den theoretischen Wert für zwei punktförmige Kerne,  $\mu R^2$ , gegeben sein.  $R$  ist der Abstand zwischen den Kernen. Da in die numerische Berechnung der Massen alle relevanten Größen wie Gitterparameter, kollektiver Pfad, Iterationsverfahren und Näherungen für Operatoren eingehen, ist der Vergleich zwischen numerischen und theoretischen Massenwerten eine gute Überprüfung der gesamten Numerik.

Bei der Überprüfung zeigte es sich, daß die Berechnung von Systemen deformierter Kerne einen höheren Aufwand verlangt als die Berechnung eines Systems von sphärischen Kernen. So mußte bei der Berechnung des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  im Vergleich zum System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  die Gitterkonstante  $\Delta$  verkleinert werden, gleichzeitig mußte der Wert für  $E_{\text{CUT}}$  vergrößert werden und damit die Anzahl der Gitterpunkte im Impulsraum. Ebenso ist das Auffinden des Sattelpunktes aufwendiger. Nicht zuletzt benötigt auch die Iteration für die Linear Response Masse mehr Iterationsschritte als bei sphärischen Fragmenten ( $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ : 20-25 Iterationen;  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ : 4 Iterationen). Bei der Berechnung des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  stellte sich heraus, daß die herkömmliche ATDHF-Methode zur Berechnung der kollektiven Masse empfindlicher auf die Einschränkungen des Gitters ( $\Delta, E_{\text{CUT}}$ ) reagiert als

die Linear Response Methode. So beträgt die Abweichung der ATDHF-Masse von der reduzierten Masse 4 % für das ATDHF-Verfahren und 0.1 % für die Linear Response Methode. Daher benutzen wir für die Berechnung der kollektiven ATDHF-Masse des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  ausschließlich die Linear Response Methode. Für das System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  funktionieren beide Methoden gleichermaßen problemlos. Bei den Ortsraumrechnungen von  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  wurde Konvergenz nach 3-4 Iterationsschritten erzielt. Es zeigte sich, daß bei der Berechnung der kollektiven ATDHF-Masse andere Parameter für den Dämpfungsfaktor (4.11) benutzt werden mußten als bei der Berechnung der Translationsmassen und des Trägheitsmomentes. Die Abweichung der kollektiven ATDHF-Masse von der reduzierten Masse ist  $< 0.25\%$ . Einige repräsentative Beispiele zur numerischen Genauigkeit der Massenparameter befinden sich in Tabellen 4-6.

Tabelle 4: Vergleich der ATDHF-Massen mit den entsprechenden theoretischen Werten für  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  berechnet mit SKIII bei einer Clusterentfernung von 12.0 fm auf dem ATDHF-Pfad.

	Theorie	ATDHF	Abweichung
$M^{\text{Koll.}}$	8.0	8.010	0.13 %
$M^Z$	32.0	32.082	0.26 %
$M^X$	32.0	32.105	0.33 %
$\theta^X$	1154.461	1158.488	0.35 %



Tabelle 5: Vergleich von ATDHF- und GCM-Massen mit den entsprechenden theoretischen Werten für  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  berechnet mit SKIII bei einer Clusterentfernung von 13.69 fm auf dem ATDHF-Pfad

	Theorie	ATDHF	Abweichung	GCM	Abweichung
$M^{\text{Koll.}}$	7.5	7.524	0.32 %	6.518	13.09 %
$M^Z$	32	32.027	0.08 %	27.092	15.34 %
$M^X$	32	32.497	1.55 %	30.201	5.62 %
$\theta^X$		1682.13		1445.44	

Tabelle 6: Vergleich von ATDHF- und GCM-Massen mit den entsprechenden theoretischen Werten für  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  berechnet mit SKM\* bei einer Clusterentfernung von 18.27 fm auf dem Gradienten-Pfad

	Theorie	ATDHF	Abweichung	GCM	Abweichung
$M^{\text{Koll.}}$	20.0	19.9521	0.24 %	19.4281	2.86 %
$M^Z$	80.0	77.6613	2.92 %	74.5693	6.79 %
$M^X$	80.0	75.5841	5.52 %	72.1978	9.75 %
$\theta^X$	6674.17	6307.17	5.50 %	6022.01	9.77 %

5. Die Subbarrierenfusion von  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ ,  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  und  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$

### 5.1 Allgemeines

Wir identifizieren die Slaterdeterminanten  $|\phi_n\rangle$ , indem wir ihnen als Index die Größe  $q_n$  zuordnen, deren Wert durch den Erwartungswert bzgl. eines Meßoperators gegeben ist:

$$q_n = \langle \phi_n | D | \phi_n \rangle \quad (5.1)$$

Die Wahl des Operators  $D$  ist reine Konvention. Für Schwerionenreaktionen ist eine sinnvolle Wahl gekennzeichnet durch eine Koordinate, die im asymptotischen Bereich gleich der Clusterentfernung ist. Solch eine Koordinate bezeichnen wir mit  $R$ ; man erhält sie aus den  $|\phi_n\rangle$  durch

$$2\mu R^2 = \langle \phi_n | r^2 Y_{20} | \phi_n \rangle - \langle Q_1 \rangle - \langle Q_2 \rangle \quad (5.2)$$

Dabei ist  $\mu$  die reduzierte Masse und  $\langle Q_1 \rangle$ ,  $\langle Q_2 \rangle$  sind die Quadrupolmomente der Fragmente entlang der Kollisionsachse. Da die Koordinate  $R$  über die Quadrupolmomente des Systems bestimmt wird, bezeichnen wir sie als "Quadrupolentfernung".

Es ist weiterhin möglich, die kollektive Koordinate  $R$  zu einer reduzierten Koordinate  $\bar{R}$  zu transformieren, bei der die kollektive Masse  $M(\bar{R})$  konstant ist und gleich der reduzierten Masse  $\mu$  ist<sup>26)</sup>

$$d\bar{R} = \sqrt{\frac{M(R)}{\mu}} dR \quad (5.3)$$

Nach der Berechnung des Potentials  $V(R)$ , des kollektiven Massenparameters  $M(R)$ , der Quantenkorrekturen  $Z(R)$  sowie der Trägheitsmomente für Translation und Rotation können wir den kollektiven Hamiltonoperator  $H_{C,L}$  bestimmen. Danach können wir aus  $H_{C,L}$  den Fusionsquerschnitt  $H$  für die Fusion unterhalb der Barriere herleiten. Wir nehmen an, daß bei diesen niedrigen Energien nur zwei orthogonale Kanäle vorliegen, nämlich elastische Streuung und Fusion. Daher trägt der Anteil der Relativwellenfunktion, der durch die Barriere penetriert, vollständig und ausschließlich zur Fusion bei. Dann kann der Fusionsquerschnitt aus der bekannten Formel für den totalen Reaktionsquerschnitt bestimmt werden.

Die Transmissionskoeffizienten für die  $L$ -te Partialwelle werden näherungsweise durch verallgemeinerte WKB-Methoden bestimmt<sup>25)</sup>

$$T_L(E_{C.m.}) = [1 + \exp(2I_L)]^{-1} \quad (5.4)$$

mit

$$I_L(E_{C.m.}) = \int_{R_a}^{R_b} dR \left\{ \frac{2M(R)}{h^2} [V(R) - Z(R) + \frac{\hbar^2}{2\theta(R)} L(L+1) - E_{C.m.}] \right\}^{1/2} \quad (5.5)$$

dabei sind  $R_a$  und  $R_b$  die klassischen Umkehrpunkte des quantenmechanischen Potentials  $V(R) - Z(R)$  unter Einbeziehung des Zentrifugalterms. Dann lautet der totale Fusionsquerschnitt:

$$\sigma_{FUS}(E_{C.m.}) = \frac{\pi \hbar^2}{2\mu E_{C.m.}} \sum_L (2L+1) T_L(E_{C.m.}) \quad (5.6)$$

Diese Gleichung gilt für unterschiedliche Fragmente wie z.B.  $^{12}\text{C}$  u.  $^{20}\text{Ne}$ . Für die Fusion identischer Kerne gilt dagegen:

$$\sigma_{FUS}(E_{C.m.}) = \frac{\pi \hbar^2}{2\mu E_{C.m.}} \sum_L (1 + (-1)^L) (2L+1) T_L(E_{C.m.}) \quad (5.7)$$

Anstelle von  $\sigma_{\text{FUS}}$  ist es günstiger, den astrophysikalischen S-Faktor zu betrachten, der auf die Kernkraft fokussiert ist und die Abweichung vom reinen Coulombfall deutlich macht:

$$S(E_{\text{c.m.}}) = E_{\text{c.m.}} \sigma_{\text{FUS}}(E_{\text{c.m.}}) \exp(2\pi z_1 z_2 e^2 / \hbar v) \quad (5.8)$$

dabei ist  $v$  die relative Geschwindigkeit der Ionen,  $z_1$  und  $z_2$  sind die Ladungszahlen der Fragmente.

Zur Verdeutlichung des Verlaufs einer Schwerionenreaktion ist in Abb. 2 der Stromdichtevektor  $\vec{j}(\vec{r})$  (Gl. (3.57)) bei drei verschiedenen relativen Entfernungen der Fragmente zusammen mit den Linien von 1 %, 10 % und 70 % der maximalen Dichte eingezeichnet. Im obersten Teil von Abb. 2 befindet sich das System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  rechts vom Sattelpunkt, also auf dem Teil des Pfades, der in die getrennte  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  Konfiguration führt. Die beiden Ionen sind noch nicht vollständig getrennt, aber man sieht deutlich, wie der Stromdichtevektor  $\vec{j}$  nach außen zeigt. Der mittlere und der untere Teil von Abb. 2 zeigen das System links vom Sattelpunkt, also auf dem Weg zu  $^{32}\text{S}$ . Im mittleren Teil sieht man deutlich, daß der Massenstrom ausschließlich auf den Mittelpunkt gerichtet ist. Hier findet der Übergang von 2 Kernen zu einem gemeinsamen System statt. Im unteren Teil von Abb. 2 ist die Fusion schon fast vollendet. Man sieht nur noch einen Massentransport in den äußeren Bereichen.

## 5.2 Die Subbarrierenfusion von $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}\rightarrow^{32}\text{S}$ und die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung

Bisher durchgeführte ATDHF-Rechnungen haben gezeigt, daß es möglich ist, eine sensitive und relevante physikalische Größe wie den experimentellen Fusionsquerschnitt exakt zu reproduzieren, wenn die effektive Wechselwirkung an die entsprechende Region der nuklearen Massentafel angefügt worden ist<sup>27)</sup>. Im Gegensatz zu diesen Rechnungen benutzen wir eine allgemeine effektive Wechselwirkung, die Skyrme-Wechselwirkung, die im gesamten Bereich der nuklearen Massentafel gültig ist.

Als Anwendung betrachten wir die Subbarrierenfusion des Systems  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}\rightarrow^{32}\text{S}$  (s. Ref. 48). Dieses System wurde ausgewählt, weil es aus abgeschlossenen sphärischen Fragmenten besteht, die sich im Vergleich zu deformierten Fragmenten, wie z.B.  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , einfach berechnen lassen. Weiterhin existiert beim System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  nur eine Konfiguration der relativen Orientierung der Fragmente zueinander. Die Beschränkung auf die Subbarrierenfusion erfolgt, weil bei der Fusion oberhalb der Barriere zusätzliche Reibungsmodelle berücksichtigt werden müssen, deren mikroskopische Beschreibung bisher noch nicht vorliegt.

Die Berechnung der Subbarrierenfusion des Systems  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}\rightarrow^{32}\text{S}$  hat nicht nur als Ziel, den experimentellen Fusionsquerschnitt zu reproduzieren, sondern dient auch als Testfall für die verschiedenen Skyrme-Parametrisierungen.

Die einzigen Parameter in den ATDHF-Rechnungen sind nämlich die der effektiven Wechselwirkung, so daß der berechnete Fusionsquerschnitt direkt von der Kraft abhängt. D.h. wir können durch den Vergleich mit dem Experiment eine Aussage über die benutzten Parametrisierungen der Skyrme-Wechselwirkung gewinnen.

Abb. 3 und 4 zeigen das klassische Potential  $V(R)$  bzw. die kollektive Masse  $M(R)$  als Funktion der Quadrupolentfernung, berechnet mit den Skyrme-Parametri-

sierungen SKII, SKIII<sup>41)</sup>, SKa<sup>42)</sup> und SKM\*<sup>44)</sup> (s. 3.1). In beiden Fällen zeigen die Kurven nur geringe Unterschiede zwischen den verschiedenen Parametrisierungen. Das Interessante dabei ist aber, wie sich die Unterschiede auf den astrophysikalischen S-Faktor der Subbarrierenfusion auswirken, denn der S-Faktor ist eine sensitive und relevante physikalische Größe.

Abb. 5 zeigt den astrophysikalischen S-Faktor für die Subbarrierenfusion des Systems  $^{160}\text{La}+^{160}\text{La}\rightarrow^{320}\text{La}$  berechnet mit den Parametrisierungen SKII, SKIII, SKa und SKM\* zusammen mit neueren experimentellen Daten von Thomas et al.<sup>49)</sup>. Ein Vergleich mit diesen Ergebnissen zeigt, daß die Parametrisierung SKM\* das beste Resultat liefert. Die Wechselwirkungen SKII, SKIII und SKa ergeben viel kleinere S-Faktoren über den ganzen Subbarrieren-Energiebereich. Im Gegensatz zu den anderen Skyrme-Kräften ist SKM\* an die Tröpfchenmodell-Barrierenhöhe von  $^{240}\text{Pu}$  angefüttet worden und berücksichtigt daher Oberflächeneigenschaften. Es scheint, daß die Berücksichtigung der Oberflächeneigenschaften wichtig ist für eine korrekte Berechnung des Fusionswirkungsquerschnitts. Frühere Rechnungen mit einer modifizierten BKN-Kraft bestätigen diese Ansicht<sup>27)</sup>. Die modifizierte BKN-Wechselwirkung wurde an Bindungsenergien und Formfaktoren der elastischen Elektronstreuung von  $^{16}\text{O}$  und  $^{40}\text{Ca}$  angefüttet und hängt daher auch von den Oberflächeneigenschaften dieser Kerne ab. Jedoch ist diese Kraft dann nur gültig in dem Bereich der nuklearen Massentafel, in dem sie angefüttet wurde. Zum Vergleich der mit diesen beiden Wechselwirkungen erzielten Resultate zeigen wir in Abb. 6 die theoretischen Kurven für SKM\* und für die modifizierte BKN-Kraft zusammen mit experimentellen Werten von Thomas et al.<sup>49)</sup>, Spinka und Winkler<sup>50)</sup>, Hulke et al.<sup>51)</sup> sowie Wu und Barnes<sup>52)</sup>. Der Vergleich zeigt, daß es auch mit einer allgemeinen Kraft wie SKM\*, die im ganzen Bereich der nuklearen Massen gilt, möglich ist, eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erhalten.

### 5.3 Die Subbarrierenfusion von $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$

Wie wir am Beispiel des Systems  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  gezeigt haben (s. Abschnitt 5.5), ist bei einem System von zwei sphärischen Fragmenten der Gradienten-Pfad in sehr guter Übereinstimmung mit dem ATDHF-Pfad. Die Unterschiede bei verschiedenen Berechnungsmethoden für die kollektive Masse (GCM- oder ATDHF-Verfahren) sind dagegen schon etwas ausgeprägter. Es erweist sich außerdem am Beispiel des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , daß die Massenberechnungsmethode einen größeren Einfluß auf den astrophysikalischen S-Faktor hat.

Daher wählen wir für die Beschreibung des aus zwei sphärischen Fragmenten bestehenden Systems  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  den Gradienten-Pfad mit der kollektiven ATDHF-Masse. Für die numerische Berechnung des  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  Systems zogen wir es vor, den Computercode zu vektorisieren, um die Möglichkeiten des im Jahre 1984 in der Kernforschungsanlage Jülich installierten Vektorrechners Cray X-MP2 auszuschöpfen (s. auch 4.2 Numerische Methoden).

Da sich bei dem schwereren System  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  das Fehlen der Spin-Bahn Kopplung stärker bemerkbar macht als bei  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ , erwarten wir nicht eine ebenso gute Reproduktion der experimentellen Daten.

Die Berechnung von  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  wird mit der Parametrisierung SKM\* durchgeführt, die sich bei der Subbarrierenfusion von  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}+^{32}\text{S}$  als die geeignetste erwiesen hat.

Abb. 7 zeigt das klassische Potential  $V(R)$  entlang des Gradienten-Pfades für  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  berechnet mit SKM\*. Abb. 8 zeigt ATDHF- und GCM-Masse für den gleichen Pfad. Wie bei einem System von zwei sphärischen Fragmenten zu erwarten ist, ist der Unterschied zwischen ATDHF- und GCM-Masse zwar deutlich sichtbar, aber über den ganzen Bereich nahezu konstant und keinen Schwankungen unterwor-

fen. Wegen des großen Coulomb-Potentials des Systems  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  kann der Energiebereich der Subbarrierenfusion nicht wie bisher bei Null beginnen. Das wird deutlich in Abb. 9, in der das für die Fusion relevante quantenkorrigierte Potential  $V(\bar{R})-Z(\bar{R})$  als Funktion der reduzierten Koordinate aufgetragen ist. Da im asymptotischen Bereich das Coulomb-Potential Werte unterhalb des Hartree-Fock Niveaus annimmt, ist die Untergrenze der Schwerpunktsenergie gegeben durch die horizontale Linie. Sie liegt bei etwa 39 MeV. Wegen des hohen Wertebereichs ist es günstiger, den Fusionsquerschnitt (5.7) anstelle des astrophysikalischen S-Faktors (5.8) anzugeben. Abb. 10 zeigt den Subbarrierenfusionsquerschnitt  $\sigma_{\text{FUS}}$  als Funktion der Schwerpunktsenergie  $E_{\text{c.m.}}$ . Zum Vergleich sind experimentelle Resultate von Aljuwair et al.<sup>53)</sup> eingetragen. Es fällt positiv auf, daß trotz fehlender Spin-Bahn-Kraft die berechneten Werte nahe an den experimentellen Daten liegen.

Wie jedoch schon bei einer Vielzahl von Schwerionenreaktionen gezeigt wurde<sup>54-57)</sup>, sieht man auch hier, daß bei eindimensionalen Barrierenpenetrationsrechnungen der Wirkungsquerschnitt der Subbarrierenfusion im Vergleich zum Experiment zu niedrig ist.

Wie von Broglia et al.<sup>29)</sup> sowie von Landowne und Pieper<sup>30)</sup> z.B. für die  $^{58}\text{Ni}+^{58}\text{Ni}$  Fusion gezeigt wurde, führen gekoppelte Kanalrechnungen, die die Kopplung zu inelastischen Anregungen und zu Transferkanälen berücksichtigen, zu einer Erhöhung des Subbarrierenfusionsquerschnitts.

Eine weitere Annahme ist, daß Einteilchen-Freiheitsgrade bei der Fusion verschiedener Isotope eine wichtige Rolle spielen. Experimente von Keller et al.<sup>58,59)</sup> für die Reaktionen  $^{90}\text{Zr}+^{90}\text{Zr}$ ,  $^{90}\text{Zr}+^{92}\text{Zr}$  und  $^{90}\text{Zr}+^{96}\text{Zr}$  zeigten einen deutlichen Anstieg des Fusionsquerschnitts unterhalb der Barriere mit steigendem Neutronenüberschuß. Neben diesen statischen Schaleneffekten wird vermu-



tet<sup>60,61</sup>), daß auch dynamische 1 Teilchen-1 Loch Anregungen, hervorgerufen z.B. durch Landau-Zener Übergänge<sup>62,63</sup>), zu einer Erhöhung des Wirkungsquerschnitts der Subbarrierenfusion beitragen können. Wie allerdings Rechnungen von Cassing<sup>64</sup>) gezeigt haben, ist für  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  dieser Effekt vernachlässigbar. Der eigentliche Grund für den Unterschied zwischen den von uns berechneten Fusionsdaten und den experimentellen Werten dürfte daher in den Vereinfachungen bei der Anwendung der Theorie zu suchen sein, d.h. in der Voraussetzung der Quartettsymmetrie für die Einteilchenwellenfunktionen und in der Vernachlässigung der  $\pi$ s-Kraft. Wegen der Quartettsymmetrie liegt der Sattelpunkt weiter innen und hat einen höheren Wert. Durch die fehlende Spin-Bahn-Kopplung ist der Hartree-Fock-Zustand des fusionierten  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  nicht so stark gebunden, wie es sein müßte. Eine Absenkung des Sattelpunktes bedeutet aber, daß der Fusionsquerschnitt sich generell erhöht. Ein Absenken des Hartree-Fock Zustands auf den wirklichen Wert bedeutet, daß das Wechselwirkungspotential vom Hartree-Fock-Punkt bis zum Sattelpunkt eine wesentlich stärkere Steigung bekommt als bisher. Dadurch werden die berechneten Fusionsdaten in Richtung der experimentellen Werte verschoben.

#### 5.4 Die Bedeutung des $\alpha$ -Transfers in der Subbarrierenfusion

Von schematischen Modellen und von gekoppelten Kanalrechnungen gibt es theoretische Hinweise und Vermutungen für die Bedeutung des  $\alpha$ -Transfers in der Subbarrierenfusion<sup>29,30</sup>). Um zu untersuchen, inwieweit diese Annahmen durch vollständig mikroskopische Rechnungen unterstützt werden, betrachten wir im Rahmen der quantisierten ATDHF-Theorie das System  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  als Beispiel<sup>65</sup>).

Die quantisierte ATDHF-Methode beruht auf Variationsprinzipien und daher sind die Ergebnisse frei von ad hoc Parametrisierungen. Der kollektive Pfad als Grundbestandteil der Theorie liefert eine mean-field Mittelung über alle reell und virtuell angeregten Reaktionskanäle im Lauf der Kollision. Der  $\alpha$ -Transfer-Kanal ist also darin enthalten und es bleibt zu untersuchen, ob sich das System diesen Kanal zunutze macht.

Als Wechselwirkung für die numerischen Rechnungen wählen wir die Skyrme III-Kraft ohne  $\kappa$ s-Term und mit einem direkten Coulomb-Anteil. Asymptotisch liegen das oblat deformierte  $^{12}\text{C}$  und das prolate  $^{20}\text{Ne}$  in einer axialsymmetrischen Konfiguration vor (s. Abb. 11). Im asymptotischen Bereich befinden sich die einzelnen Kerne in ihren jeweiligen Hartree-Fock Zuständen. Abb. 12 zeigt das kollektive Potential  $V(\bar{R})$  als Funktion der reduzierten Koordinate  $\bar{R}$ . Es ist offenkundig, daß in der Gegend von  $\bar{R} = 6$  fm das  $V(\bar{R})$  der  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  Konfiguration zusammenfällt mit dem kollektiven Potential, das von der asymptotischen  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  Konfiguration herrührt (gestrichelte Linie). Dieses einfache Merkmal beweist uns, daß ein  $\alpha$ -Transfer stattgefunden hat und daß der weitere Fusionsprozeß der eines  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  Systems ist. Der Transfer findet zwischen 9.5 und 6.5 fm statt und kann deutlich gesehen werden anhand der Höhenlinienplots in der linken Hälfte von Abb. 13 an den Stellen a, b und c, wie in Abb. 12 angedeutet. Bei den Abständen, die für die Subbarrierenfusion wichtig sind, ist der

$\alpha$ -Transfer bereits zu einem großen Teil vollzogen. Man erhält also das interessante Resultat, daß die Subbarrierenfusion dieses Systems vom  $\alpha$ -Transfer beeinflusst wird und daß dieses durch die quantisierte ATDHF-Theorie berücksichtigt wird. Der beste theoretische Beweis für die Relevanz des  $\alpha$ -Transfers in der Subbarrierenfusion von  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  wäre natürlich die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Dies kann für die  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}\rightarrow^{32}\text{S}$  Fusion gezeigt werden (s. 5.3), die jedoch keinen  $\alpha$ -Transfer aufweist. Beim vorliegenden System aber ist der direkte Vergleich mit experimentellen Resultaten schwierig, da die beteiligten Ionen deformiert sind und daher komplizierte Drehimpulsprojektionsmethoden angewendet werden müßten. Man kann jedoch untersuchen, wie stark sich der Fusionsquerschnitt bei einer Unterdrückung des  $\alpha$ -Transfer Kanals ändern würde. Zu diesem Zweck konstruieren wir den kollektiven Pfad der  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}\rightarrow^{32}\text{S}$  Fusion ebenfalls noch in der Sudden-Näherung. Dabei gehen wir von der gleichen asymptotischen Konfiguration aus wie in der ATDHF-Theorie, d.h. von zwei Hartree-Fock Determinanten. Dann werden die relativen Entfernungen ständig verkleinert, während die innere Struktur der Determinanten erhalten bleibt. Bei jeder Entfernung werden dann die Einteilchenwellenfunktionen orthonormalisiert. Diese Konstruktion des kollektiven Pfades ist bekannt aus der GCM- oder RGM-Theorie für die Reaktionen leichter Ionen<sup>66)</sup>. Dort benutzt man sogar eher harmonische Oszillator-Wellenfunktionen anstatt Hartree-Fock-Wellenfunktionen wie im vorliegenden Fall. Die entsprechenden Linien gleicher Dichte können in der rechten Hälfte von Abb. 13 gesehen werden. Im Gegensatz zur linken Hälfte (ATDHF-Resultate) bleibt die innere Struktur der Ionen sogar in der Überlappung erhalten und es findet in dem für die Fusion relevanten Bereich kein Übergang zu einem symmetrischen System statt.

Das Potential  $V(\vec{R})$  der Sudden-Näherung ist gegeben durch die gepunktete Linie in Abb. 12. Höhe und Position der Barriere sind merklich verschieden von denen

der ATDHF-Theorie. Für  $\bar{R} < 6$  fm, d.h. nachdem der  $\alpha$ -transfer in der quantisierten ATDHF-Theorie stattgefunden hat, ist das sudden-Potential um etwa 15 MeV gegenüber dem adiabatischen angeregt. Dies bedeutet, daß dieser Betrag wegen des  $\alpha$ -Transfers für die Bindungsenergie gewonnen wird. Wie man von diesen Ergebnissen erwartet, ist der Effekt auf den Fusionswirkungsquerschnitt sehr groß. Abb. 14 zeigt den astrophysikalischen S-Faktor als Funktion der Schwerpunktenenergie. Der S-Faktor ist im Überlapp-Bereich des Fusionsprozesses eine besonders sensitive Größe. Man sieht, daß der  $\alpha$ -Transfer in der ATDHF-Theorie einen S-Faktor bewirkt, der in der Gegend der experimentellen Daten um zwei Größenordnungen höher ist als der astrophysikalische Faktor der sudden-Näherung; bei niedrigeren Energien beträgt der Unterschied sogar drei Größenordnungen. Dies ist ein sehr großer Effekt, der bei den Berechnungen nicht vernachlässigt werden kann.

Zusammenfassend haben wir am Beispiel einer mikroskopischen Rechnung für das System  $^{12}\text{C} + ^{20}\text{Ne} \rightarrow ^{32}\text{S}$  gesehen, daß der  $\alpha$ -Transfer ein Prozeß ist, der den Wirkungsquerschnitt der Subbarrierenfusion um Größenordnungen erhöhen kann und der deshalb in aktuellen Fusionsrechnungen berücksichtigt werden muß. Es ist ebenfalls interessant zu bemerken, daß die quantisierte ATDHF-Theorie in der Lage ist, den  $\alpha$ -Transfer zu beschreiben und seine Effekte klarzustellen.

### 5.5 Konzeptioneller Vergleich von quantisierter ATDHF-Theorie und GCM-Theorie am Beispiel des Systems $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$

Das System  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , das solch einen deutlichen Strukturwandel wie einen  $\alpha$ -Transfer aufweist (s. Abschnitt 5.4), ist sehr gut dazu geeignet, die verschiedenen Methoden zur Berechnung des kollektiven Pfades (ATDHF- und Gradienten-Pfad) und der Massenparameter (ATDHF- und GCM-Masse) zu untersuchen<sup>67)</sup>. Insbesondere ist die Frage relevant, ob der hohe numerische Aufwand der quantisierten ATDHF-Theorie gerechtfertigt ist oder ob nicht auch einfachere Methoden genügen.

Wir betrachten die Konfiguration des Systems wie in Abb. 11, d.h. es liegt eine axiale Kollision vor.

#### 5.5a Der kollektive Pfad und die Massenparameter

Abb. 15 und 16 zeigen das kollektive Potential  $V(R)$  des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ , berechnet entlang des Gradienten- und ATDHF-Pfades als Funktion der Quadrupolentfernung mit den Wechselwirkungen SKIII und SKV. Im Überlappbereich links vom Sattelpunkt, gibt es beträchtliche Unterschiede zwischen Gradienten- und ATDHF-Pfad. Dieser Effekt ist bei der Wechselwirkung SKIII stärker ausgeprägt als bei SKV. Bei Annäherung an den Hartree-Fock Punkt verschwinden diese Unterschiede und die beiden Potentiale sind identisch. Wie man in Abb. 15 sehen kann, ist das Potential des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  in diesem Bereich des Pfades ebenfalls identisch mit dem Potential des Systems  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ . Die allmählich fortschreitende Veränderung der  $^{12}+^{20}\text{Ne}$  Konfiguration in eine  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  Konfiguration ist ein deutliches Anzeichen für einen  $\alpha$ -Transfer (s. auch 5.4).

Die kollektiven Massenparameter können nach vier verschiedenen Methoden berechnet werden:

- 1) ATDHF-Pfad mit ATDHF-Masse
- 2) ATDHF-Pfad mit GCM-Masse
- 3) GRAD-Pfad mit ATDHF-Masse
- 4) GRAD-Pfad mit GCM-Masse

Abb. 17 und 18 zeigen  $M(R)$ , die kollektive Masse der Relativbewegung, für das System  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  berechnet mit SKIII und SKV. In Abb. 19 und 20 ist das Verhältnis von ATDHF-zu GCM-Masse eingezeichnet. Für die kollektive Masse sind die Berechnungen entlang des Gradienten-Pfades durchgeführt worden; die Translationsmasse in z-Richtung und das Trägheitsmoment für Rotationen um die x-Achse wurden entlang des ATDHF-Pfades berechnet. Für die kollektive Masse ergeben sich beachtliche Unterschiede zwischen den verschiedenen Methoden. Entlang des gleichen Pfades können ATDHF- und GCM-Masse um einen Faktor 2 voneinander abweichen und die gleiche Masse entlang unterschiedlicher Pfade zeigt Differenzen bis zu einem Faktor 4. Ähnliche Effekte treten bei den Trägheitsmomenten für Translation und Rotation auf. Dort können die Unterschiede bis zu 50 % erreichen. Diese Zahlen sind der Genauigkeit gegenüberzustellen, mit der ATDHF die asymptotisch korrekten Werte reproduziert:

Die Translationsmasse in z-Richtung weicht um 0.18 % ab, die Translationsmasse in x-Richtung um 1.6 % und die kollektive ATDHF-Masse der Relativbewegung stimmt mit der reduzierten Masse besser als 0.5 % überein. Die Werte der entsprechenden GCM-Massenparameter dagegen lauten 15.3 %, 5.6 % und 13.0 %. Aus diesen Zahlen kann man einige einfache Folgerungen ziehen. Entlang eines gegebenen Pfades weichen die GCM-Massen deutlich von den asymptotisch korrekten ATDHF-Massen ab. Daher ist es notwendig, die ATDHF-Methode zu benutzen.

Nach dem Übergang zur reduzierten Koordinate sind die Änderungen der kollektiven Masse im Potential enthalten. Das Potential  $V(R)$  mit Berücksichtigung der Quantenkorrekturen  $Z(R)$  ist in Abb. 21 und 22 eingezeichnet als Funktion der reduzierten Koordinate für ATDHF- und GRAD-Pfad und mit den verschiedenen Methoden zur Berechnung der Masse. Die Resultate zeigen, daß die Verfahren zur Berechnung des kollektiven Pfades und der kollektiven Masse einen sichtbaren Einfluß auf die Penetrationseigenschaften des Systems haben. Dieser Einfluß wird noch deutlicher im nächsten Abschnitt, wenn astrophysikalische S-Faktoren für die Subbarrierenfusion des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}\rightarrow^{32}\text{S}$  berechnet werden. Für Systeme von zwei Kernen mit abgeschlossenen Schalen ist das Verfahren zur Berechnung des kollektiven Pfades und der kollektiven Masse nicht so relevant. Berechnungen für das System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  zeigen, daß es praktisch keinen Unterschied in den Potentialen gibt (s. Abb. 23) und nur kleine Abweichungen in der kollektiven Masse (s. Abb. 24).

#### 5.5b Subbarrierenfusion für das System $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}\rightarrow^{32}\text{S}$

Die Berechnung des astrophysikalischen S-Faktors erfolgt wie in Abschnitt 5.1. Abb. 25 und 26 zeigen den astrophysikalischen S-Faktor für die Fusion  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}\rightarrow^{32}\text{S}$  berechnet mit der Wechselwirkung SKIII bzw. SKV. Die Rechnungen sind jeweils für den ATDHF- und GRAD-Pfad mit den beiden verschiedenen Berechnungsmethoden für die kollektive Masse durchgeführt worden. Die in den Quantenkorrekturen auftretenden Trägheitsmomente für Translation und Rotation sind mit der Thouless-Valatin Theorie berechnet.

Die Resultate zeigen, daß es deutliche Effekte gibt, die bei  $E_{\text{c.m.}} \sim 1 \text{ MeV}$  bis zu drei Größenordnungen im astrophysikalischen S-Faktor ausmachen. Offenkundig

ist der S-Faktor eine Größe, die sensitiv auf die bei der Penetrationsrechnung verwendete Wechselwirkung und Vielteilchenmethode reagiert.

Es stellt sich die Frage, welche der hier benutzten Methoden vorzuziehen ist. Auf den ersten Blick sieht es so aus, als ob der GRAD-Pfad kombiniert mit der ATDHF-Masse der beste wäre, da er am nächsten an die experimentellen Daten<sup>51)</sup> herankommt. Ein direkter Vergleich mit den Meßergebnissen hilft aber nicht sehr viel. Die theoretischen Resultate leiden unter den Vereinfachungen der Wechselwirkung, sie besitzen keine korrekten Drehimpulseigenschaften (weil keine Projektionen durchgeführt wurden) und schließlich ist auch nur eine relative Orientierung der Fragmente berücksichtigt worden. Daher ist das einzige zuverlässige Prinzip zur Auswahl einer theoretischen Methode die Konsistenz des benutzten Verfahrens. Deshalb sollte man den ATDHF-Pfad mit der ATDHF-Masse vorziehen, da er konsistent aus allgemeinen theoretischen Prinzipien abgeleitet wird und die gewünschten Entkopplungseigenschaften aufweist. In einer adiabatischen Ein-Parameter-Beschreibung der Subbarrierenfusion ist daher die quantisierte ATDHF-Theorie die geeignetste Methode. Eine willkürliche und nicht-konsistente Wahl von Pfad und Masse kann zu deutlich falschen Resultaten führen.

Man kann aus den Abb. 25 und 26 jedoch lernen, daß der GRAD-Pfad zusammen mit der ATDHF-Masse eine vernünftige Näherung ist, die im Fall der Skyrme V Wechselwirkung sogar sehr gut funktioniert. Darüber hinaus ist festzustellen, daß die Methoden, die die Masse anstatt den Pfad annähern, vor allem in der Gegend niedriger Energie starke Abweichungen von den ATDHF-Werten zeigen.



## 6. Zusammenfassung und Schlußfolgerungen

Der Hauptgegenstand dieser Arbeit ist die numerische Berechnung der Subbarrierenfusion von realistischen Schwerionensystemen im Rahmen der quantisierten ATDHF-Theorie unter Verwendung der Skyrme-Wechselwirkung.

Die Rechnungen wurden auf dreidimensionalen Orts- und Impulsraumgittern durchgeführt. Für die Einteilchenwellenfunktionen wurde Quartettsymmetrie vorausgesetzt. Die Skyrme-Wechselwirkung wurde ohne Spin-Bahn Kopplung und mit einem direkten Coulombanteil benutzt.

Es zeigte sich, daß die numerische Berechnung von realistischen Schwerionensystemen mit der Skyrme-Kraft bei vertretbarem technischen Aufwand durchführbar ist. Für das einfache System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ , bestehend aus zwei sphärischen Kernen mit abgeschlossenen Schalen, erhielten wir bei Verwendung der Wechselwirkung SKM\* unterhalb der Barriere eine sehr gute Übereinstimmung des berechneten Fusionsquerschnitts mit den experimentellen Daten bei allen verfügbaren Energien.

Da die quantisierte ATDHF-Theorie parameterfrei ist und nur die Koeffizienten der Wechselwirkung in die Rechnungen eingehen, können Vergleichsrechnungen mit verschiedenen Parametrisierungen der Skyrme-Kraft als Test für die Wechselwirkung dienen. Wir erhalten als Resultat, daß nur solche Kräfte, bei deren Bestimmung die Oberflächeneigenschaften der Kerne berücksichtigt wurden, gute Ergebnisse bei der Subbarrierenfusion liefern.

Da es bereits theoretische Vermutungen über die Bedeutung von Transferreaktionen in der Subbarrierenfusion gibt, ist es wichtig, diesen Effekt numerisch zu bestimmen. Bei der Berechnung des aus zwei deformierten Fragmenten bestehenden

Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  mit der quantisierten ATDHF-Theorie zeigte es sich, daß während der Fusion ein  $\alpha$ -Transfer stattfindet.

Zu Vergleichszwecken haben wir daher eine sudden-Näherung konstruiert, die den  $\alpha$ -transfer unterdrückt. Als Resultat erhielten wir, daß der Fusionsquerschnitt unterhalb der Barriere durch den  $\alpha$ -Transfer um zwei bis drei Größenordnungen angehoben wurde.

Da die Anwendung der ATDHF-Theorie auf eine realistische Schwerionenreaktion sehr aufwendig ist, stellte sich die Frage, ob nicht auch numerisch einfachere, quantenmechanische und mikroskopische Theorien, wie z.B. die GCM-Theorie, zum selben Ziel führen. Der Vergleich zwischen quantisierter ATDHF-Theorie und der GCM-Methode wurde am Beispiel des allgemeinen Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  durchgeführt. Der kollektive Pfad wurde nach der ATDHF- und nach der Gradienten-Methode (steepest descent) berechnet. Um die Massenberechnung entlang des Gradienten-Pfades zu verbessern, wurde ein Iterationsverfahren zur Bestimmung der Linear Response Masse entwickelt. Die Linear Response Massen entsprechen den ATDHF-Massen. Für jeden Pfad konnten dann die Massenparameter in GCM- und ATDHF-Näherung berechnet werden. Es erwies sich, daß das iterative Verfahren zur Bestimmung der kollektiven ATDHF-Masse der Relativbewegung von  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  numerisch günstiger war als die eigentliche ATDHF-Berechnung. Die Massenparameter selbst sind sehr empfindliche Größen. Entlang desselben Pfades unterschieden sich ATDHF- und GCM-Masse der Relativbewegung um einen Faktor 2, die gleiche Masse entlang verschiedener Pfade zeigte Abweichungen bis zu einem Faktor 4.

Die physikalischen Auswirkungen der unterschiedlichen Näherungsmethoden für Pfad und Masse zeigten sich deutlich am astrophysikalischen S-Faktor für die Fusion unterhalb der Barriere. Dort ergaben sich bei niedrigen Schwerpunkts-

energien Abweichungen bis zu drei Größenordnungen und im Bereich der experimentellen Resultate bis zu einer Größenordnung.

In einer solchen Situation ist die Konsistenz der Methode die einzige Leitlinie zur Rechtfertigung einer Theorie, eine Forderung, die bei der betrachteten Auswahl der Theorien am besten durch die quantisierte ATDHF-Theorie erfüllt wird. Es zeigte sich jedoch, daß eine numerisch einfachere Methode, nämlich Gradienten-Pfad mit ATDHF-Masse, eine vernünftige Näherung für die vollständige ATDHF-Methode ist, insbesondere bei doppelt abgeschlossenen Fragmenten.

Diese Erkenntnis benutzten wir bei der Berechnung der Subbarrierenfusion des Systems  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$ . Als Wechselwirkung verwendeten wir die in den  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  Rechnungen bewährte Kraft SKM\*. Die im Vergleich zum  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  System größere Diskrepanz zwischen berechneten Fusionsquerschnitten und den experimentellen Werten läßt sich erklären durch die Näherung der Quartettsymmetrie und durch die Vernachlässigung der Spin-Rahn Kraft. Eine diesbezügliche Verbesserung und damit ein größerer numerischer Aufwand sollte dann auch für Systeme dieser Größenordnung zu einer besseren Beschreibung der Fusion unterhalb der Barriere führen.

Insgesamt gesehen zeigt es sich, daß die quantisierte ATDHF-Theorie bei allgemeinen Systemen wesentliche Prozesse berücksichtigt und daß sie darüber hinaus bei Systemen sphärischer Fragmente die Subbarrierenfusion sehr gut beschreibt. Bei Reaktionen deformierter Kerne bilden Drehimpulsprojektionen und gekoppelte Kanalrechnungen, die inelastische Anregungen berücksichtigen, eine Möglichkeit, die Resultate weiter zu verbessern.

## Anhang A1: Die Thouless-Valatin Masse

Die Thouless-Valatin-Methode zur Berechnung der Massen von nuklearen Systemen ist eine Erweiterung des Cranking-Modells. Das rotierende Potential wird selbstkonsistent im Rahmen der zeitabhängigen Hartree-Fock Theorie (TDHF) bestimmt. Wir betrachten das Thouless-Valatin Verfahren für das Beispiel einer Rotation mit konstanter Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  um die x-Achse. Im rotierenden Koordinatensystem lautet dann die TDHF-Gleichung:

$$i \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{h} - \omega \hbar^2 J^x, \rho] \quad (\text{A1.1})$$

Dabei ist  $\omega J^x$  der Cranking-Operator,  $\rho$  der Dichteoperator und  $\hat{h}$  der Hartree-Fock Hamiltonoperator.  $\rho, \hat{h}$  werden im rotierenden Koordinatensystem bestimmt.  $\rho^{(0)}$  und  $\hat{h}^{(0)}$  sind die entsprechenden Operatoren des ruhenden Systems mit  $\omega=0$ . Die Multiplikation des Cranking-Operators mit  $\hbar^2$  ermöglicht einen direkten Vergleich mit der von uns gewählten Form der Linear Response Gl. (3.62). Die zu (A1.1) entsprechende stationäre Gleichung lautet:

$$[\hat{h} - \omega \hbar^2 J^x, \rho] = 0 \quad (\text{A1.2})$$

Die Lösungen für  $\omega=0$  erhält man durch:

$$[\hat{h}^{(0)}, \rho^{(0)}] = 0 \quad (\text{A1.3})$$

Der Dichteoperator  $\rho$  des rotierenden Systems wird in eine Reihe nach Potenzen von  $\omega$  entwickelt und nach dem linearen Glied abgebrochen:

$$\rho \approx \rho^{(0)} + \rho^{(1)} \quad (\text{A1.4})$$

Die stationäre Gleichung (A1.2) geht dann über in:

$$[\hat{h}^{(0)}, \rho^{(1)}] + [\hat{h}^{(1)}, \rho^{(0)}] = \omega \hbar^2 [J^X, \rho^{(0)}] \quad (A1.5)$$

$\hat{h}^{(0)}$  und  $\hat{h}^{(1)}$  sind dabei die Anteile des Hartree-Fock-Hamiltonoperators, die von  $\rho^{(0)}$  bzw.  $\rho^{(1)}$  abhängen. (A1.5) ist eine Gleichung zur Bestimmung von  $\rho^{(1)}$ , d.h. zur Bestimmung der Dichtematrix des rotierenden Systems. Aus dieser Dichtematrix kann dann das Thouless-Valatin Trägheitsmoment  $\theta_x$  berechnet werden. Der zweite Kommutator auf der linken Seite von (A1.5) stellt einen Korrekturterm dar, der den Einfluß des rotierenden Systems auf den selbstkonsistenten Hartree-Fock-Hamiltonoperator  $\hat{h}$  beschreibt. Dieser Korrekturterm ist der Unterschied zwischen Inglis Cranking Modell und Thouless-Valatin Modell. Für die weiteren Berechnungen ist es sinnvoll, zur Matrixdarstellung von (A1.5) überzugehen. Es gilt im einzelnen

$$[\hat{h}^{(0)}, \rho^{(1)}] = (\hat{h}_m^{(0)} - \hat{h}_i^{(0)}) \rho_{mi}^{(1)} + (\hat{h}_i^{(0)} - \hat{h}_m^{(0)}) \rho_{im}^{(1)} \quad (A1.6)$$

$$[\hat{h}^{(1)}, \rho^{(0)}] = \text{tr}(V \rho^{(1)})_{mi} - \text{tr}(V \rho^{(1)})_{im} \quad (A1.7)$$

$$[J^X, \rho^{(0)}] = J_{mi}^X - J_{im}^X \quad (A1.8)$$

Damit ist dann Gl. (A1.5) äquivalent zu:

$$(\hat{h}_m^{(0)} - \hat{h}_i^{(0)}) \rho_{mi}^{(1)} + \sum_{nj} \{V_{mj, in} \rho_{nj}^{(1)} + V_{mn, ij} \rho_{jn}^{(1)}\} = \omega \hbar^2 J_{mi}^X \quad (A1.9a)$$

$$\sum_{nj} \{V_{ij, mn} \rho_{nj}^{(1)} + V_{in, mj} \rho_{jn}^{(1)}\} + (\hat{h}_m^{(0)} - \hat{h}_i^{(0)}) \rho_{im}^{(1)} = \omega \hbar^2 J_{im}^X \quad (A1.9b)$$

Die Gl. (A1.9a) und (A1.9b) lassen sich zusammenfassen zu:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{nj}^{(1)} \\ \rho_{jn}^{(1)} \end{pmatrix} = \omega \hbar^2 \begin{pmatrix} J_{mi}^x \\ J_{im}^x \end{pmatrix} \quad (\text{A1.10})$$

mit

$$A_{minj} = (\hat{h}_n^{(0)} - \hat{h}_j^{(0)}) \delta_{n,m} \delta_{ij} + V_{mj,in} \quad (\text{A1.11a})$$

$$B_{minj} = V_{mn,ij} \quad (\text{A1.11b})$$

Zur Berechnung des Trägheitsmoments wird nun Gl. (A1.10) von links mit  $(\rho_{im}^{(1)}, \rho_{mi}^{(1)})$  multipliziert:

$$(\rho_{im}^{(1)}, \rho_{mi}^{(1)}) \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{nj}^{(1)} \\ \rho_{jn}^{(1)} \end{pmatrix} = \omega \hbar^2 (\rho_{im}^{(1)}, \rho_{mi}^{(1)}) \begin{pmatrix} J_{mi}^x \\ J_{im}^x \end{pmatrix} \quad (\text{A1.12})$$

Es gilt:

$$\text{tr}(\rho^{(1)} J^x) = \sum_{mi} \{ \rho_{mi}^{(1)} J_{im}^x + \rho_{im}^{(1)} J_{mi}^x \} \quad (\text{A1.13})$$

Der Erwartungswert von  $J^x$  ist gleich dem Produkt aus Trägheitsmoment und Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  (falls  $\omega$  senkrecht zur Symmetrieachse des Systems liegt):

$$\langle J^x \rangle = \theta_X^{TV} \omega \quad (\text{A1.14})$$

Andererseits ist  $\langle J^x \rangle = \langle J^x \rangle^{(0)} + \langle J^x \rangle^{(1)}$ , aber nur  $\langle J^x \rangle^{(1)}$  ist ungleich 0:

$$\theta_X^{TV} \omega = \langle J^x \rangle^{(1)} = \text{tr}(\rho^{(1)} J^x) \quad (\text{A1.15})$$

Einsetzen von (A1.15) in (A1.12) ergibt dann die endgültige Formel für die Berechnung des Thouless-Valatin Trägheitsmoments  $\theta_X^{TV}$ :

$$\hbar^2 \theta_X^{TV} = \left( \frac{\rho_{im}^{(1)}}{\omega}, \frac{\rho_{mi}^{(1)}}{\omega} \right) \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{nj}^{(1)}/\omega \\ \rho_{jn}^{(1)}/\omega \end{pmatrix} \quad (A1.16)$$

Damit ist  $\theta_X^{TV}$  bestimmt unter der Voraussetzung, daß die Dichte  $\rho^{(1)}$  bekannt ist.  $\rho^{(1)}$  kann aus Gl. (A1.5) bestimmt werden. Wir werden im Anhang (A2) sehen, daß (A1.5) äquivalent zur Linear Response Gl. (3.67) ist. Diese Äquivalenz ist natürlich auch der Grund dafür, daß Linear Response und Thouless-Valatin Masse identisch sind, wie wir in Anhang (A2) dann auch explizit zeigen werden. Ebenso ist die Äquivalenz von Thouless-Valatin Masse und ATDHF-Masse darauf zurückzuführen, daß in beiden Fällen gleiche Reihenentwicklungen der Dichtematrix für kleine kollektive Geschwindigkeiten durchgeführt werden.

## Anhang A2: Die Äquivalenz von Linear Response und Thouless-Valatin-Masse

Wir wollen zunächst zeigen, daß die Linear Response Gl. (3.62) und die stationäre Gl. (A1.5) von Thouless und Valatin identisch sind. Die Linear Response Gl. lautet:

$$[H, R]_{ph} |\phi\rangle = \hbar^2 J_{ph}^X |\phi\rangle \quad (A2.1)$$

wobei R ein allgemeiner ph-Operator, d.h. 1 Teilchen-1 Loch und 1 Loch-1 Teilchen Operator ist. Für einen beliebigen ph-Operator gilt:

$$[H, R]_{ph} = [W_0, R]_{ph} + \text{Tr}\{V[R, \rho_0]\}_{ph} \quad (A2.2)$$

Also folgt:

$$\begin{aligned} [H, R]_{ph} |\phi\rangle &= \sum_{mi} \{ [W_0, R]_{mi} a_m^+ a_i + [W_0, R]_{im} a_i^+ a_m \\ &\quad + \text{Tr}\{V[R, \rho_0]\}_{mi} a_m^+ a_i + \text{Tr}\{V[R, \rho_0]\}_{im} a_i^+ a_m \} |\phi\rangle \end{aligned} \quad (A2.3)$$

$$= \hbar^2 \sum_{mi} \{ J_{mi}^X a_m^+ a_i + J_{im}^X a_i^+ a_m \} |\phi\rangle$$

$$[W_0, R]_{mi} + \text{Tr}\{V[R, \rho_0]\}_{mi} = \hbar^2 J_{mi}^X \quad (A2.4a)$$

$$[W_0, R]_{im} + \text{Tr}\{V[R, \rho_0]\}_{im} = \hbar^2 J_{im}^X \quad (A2.4b)$$

Die Gl. (A1.5) von Thouless und Valatin lautet in der entsprechenden Darstellung:



$$[h^{(0)}, \rho^{(1)}]_{mi} + \text{Tr}(V\rho^{(1)})_{mi} = \omega \hbar^2 J_{mi}^x \quad (\text{A2.5a})$$

$$[h^{(0)}, \rho^{(1)}]_{im} + \text{Tr}(V\rho^{(1)})_{im} = \omega \hbar^2 J_{im}^x \quad (\text{A2.5b})$$

Für die weitere Umformung benötigen wir jetzt die Voraussetzung, daß sämtliche Operatoren nur auf Slaterdeterminanten angewendet werden, so daß die Teilchen-Loch Anteile  $a_m^\dagger a_m$  (A2.4b) und (A2.5b) vernachlässigt werden können. Mit dieser Vereinfachung gilt dann für einen allgemeinen Teilchen-Loch Operator R:

$$[R, \rho_0] = R \quad (\text{A2.6})$$

denn einerseits ist  $[R, \rho_0] = R\rho_0 - \rho_0 R = R - \rho_0 R$  und andererseits gilt

$$R = (1 - \rho_0)R\rho_0 = R\rho_0 - \rho_0 R\rho_0 = R - \rho_0 R \quad (\text{A2.7})$$

Einsetzen von (A2.6) in (A2.4a) ergibt dann:

$$[W_0, [R, \rho_0]]_{mi} + \text{Tr}\{V[R, \rho_0]\}_{mi} = \hbar^2 J_{mi}^x \quad (\text{A2.8})$$

$$[W_0, \rho_R]_{mi} + \text{Tr}\{V\rho_R\}_{mi} = \hbar^2 \omega J_{mi}^x \quad (\text{A2.9a})$$

mit

$$\rho_R = \omega [R, \rho_0] \quad (\text{A2.9b})$$

Damit haben wir gezeigt, daß Gl. (A2.9a) der Linear Response Methode und Gl. (A2.5a) für die Thouless-Valatin Masse identisch sind, denn in beiden Fällen liegt dieselbe Gleichung zur Bestimmung eines Dichteoperators  $\rho$  vor. Daher gilt:

$$\rho_R = \rho_1 \quad (A2.10)$$

Daraus erhalten wir dann den Zusammenhang zwischen  $\rho_1$  und dem Linear Response Operator R:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \omega [R, \rho_0] = \omega R \\ R &= \frac{\rho_1}{\omega} \end{aligned} \quad (A2.11)$$

Die Beziehung (A2.11) erlaubt nun, explizit zu zeigen, daß die Linear Response Masse (3.67) und die Thouless-Valatin Masse (A1.16) identisch sind.

Wir schreiben Gl. (3.67) zunächst in Matrixdarstellung. Ein 1 Teilchen-1 Loch und 1 Loch-1 Teilchen Operator R ist gegeben durch:

$$R = \sum_{mi} R_{mi} a_m^+ a_i + \sum_{mi} R_{im} a_i^+ a_m \quad (A2.12)$$

Wir definieren zwei Matrizen A und B:

$$A_{minj} = \langle \phi | [a_i^+ a_m, [H, a_n^+ a_j]] | \phi \rangle \quad (A2.13)$$

$$B_{mijn} = \langle \phi | [a_i^+ a_m, [H, a_j^+ a_n]] | \phi \rangle \quad (A2.14)$$

Diese Definitionen stimmen überein mit (A1.11a) und (A1.11b) (s. auch Ref. 16)).

Wie man durch Nachrechnen feststellen kann, gilt:

$$A_{minj}^* = A_{imjn} \quad (A2.15)$$

$$B_{mijn}^* = B_{imjn} \quad (A2.16)$$

Damit läßt sich Gl. (3.67) für die Linear Response Masse schreiben als:

$$\begin{aligned} \hbar^2 \theta_x^{LR} &= \langle \phi | [R, [H, R]] | \phi \rangle \\ &= \sum_{m, n, j} \{ R_{mi} B_{mijn}^* R_{nj} + R_{mi} A_{minj}^* R_{jn} \\ &\quad + R_{im} A_{minj} R_{nj} + R_{im} B_{mijn} R_{jn} \} \end{aligned} \quad (A2.17)$$

In formaler Matrixdarstellung lautet (A2.17):

$$\begin{aligned} \hbar^2 \theta_x^{LR} &= \sum_{m, n, j} (R_{im} R_{mi}) \begin{pmatrix} A_{minj} & B_{mijn} \\ B_{mijn}^* & A_{minj}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{nj} \\ R_{jn} \end{pmatrix} \\ &= (R^* R) \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ R^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (A2.18)$$

Der Vergleich mit (A1.16) ergibt, daß die Linear Response Masse äquivalent zur Thouless-Valatin Masse ist, wenn  $R = \rho^1 / \omega$ . Das ist aber nach Gl. (A2.11) erfüllt.

### Anhang A3: Die GCM-Masse für Skyrme-Wechselwirkungen

Gl. (3.72) kann umgeformt werden zu:

$$\text{Tr}\{\text{Tr}\{[\tilde{Q}, \rho_0]v\}[\tilde{Q}, \rho_0]\} = \text{Tr}\text{Tr}\{\rho_{\tilde{Q}} v \rho_{\tilde{Q}}\} \quad (\text{A3.1})$$

dabei ist  $\rho_{\tilde{Q}}$  gegeben durch:

$$\rho_{\tilde{Q}} = [\tilde{Q}, \rho_0] \quad (\text{A3.2})$$

Die rechte Seite der Gl. (A3.1) stellt, bis auf einen Faktor 2, den Beitrag der Dichte  $\rho_{\tilde{Q}}$  zur Hartree-Fock Energie dar. Im Fall der Skyrme-Wechselwirkung lautet die Hartree-Fock Energie:

$$\begin{aligned} E = \int d^3r H(\vec{r}) = \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\vec{r}) + \frac{3}{8} t_0 \rho^2(\vec{r}) + \frac{3t_1+5t_2}{16} (\rho(\vec{r})\tau(\vec{r}) - \vec{j}^2(\vec{r}) \right. \\ \left. - \frac{1}{64} (9t_1-5t_2)\rho(\vec{r})\nabla^2(\vec{r}) + \frac{1}{16} t_3 \rho^{2+\alpha}(\vec{r}) + H_{\text{Coul}}(\vec{r}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A3.3})$$

Der einzige von  $\rho$  abhängige Beitrag zu  $E$  ist der Term proportional zu  $\vec{j}^2(\vec{r})$ .  
D.h.:

$$\text{Tr}\text{Tr}\{\rho_{\tilde{Q}} v \rho_{\tilde{Q}}\} = - \frac{3t_1+5t_2}{32} \int d^3r \vec{j}_{\tilde{Q}}^2(\vec{r}) \quad (\text{A3.4})$$

## Anhang B: Spinsättigung

Wir behandeln hier die Vereinfachung der Spindichte bei Vorliegen von Spinsättigung. Unter Spinsättigung verstehen wir dabei folgendes: Die Spins der Neutronen sättigen sich paarweise. Der Ortsanteil der zugehörigen Wellenfunktion ist dabei gleich. Entsprechendes gilt für die Protonen. Dabei sei die Neutronenanzahl und die Protonenanzahl jeweils gerade. Wir gehen aus vom vektoriel-  
len Anteil der Spindichte (3.15):

$$\begin{aligned}\vec{S}_q(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{\sigma\sigma'} \rho_q(\vec{r}\sigma, \vec{r}'\sigma') \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle \\ &= \sum_{k=1}^A \phi_k(\vec{r}q) \phi_k^*(\vec{r}'q) \sum_{\sigma\sigma'} \langle \sigma | x_k \rangle \langle x_k | \sigma' \rangle \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle\end{aligned}\quad (B1)$$

dabei ist  $\phi_k$  der Ortsanteil der Einteilchenwellenfunktion und  $x_k$  der Spinanteil. Jetzt benutzen wir, daß je zwei Teilchen den gleichen Ortsanteil  $\phi$  sowie paarweise abgesättigten Spin besitzen. Dann folgt aus (B.1):

$$\begin{aligned}\vec{S}_q(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{k=1}^{A/2} \phi_{k^+}(\vec{r}q) \phi_{k^+}^*(\vec{r}'q) \sum_{\sigma, \sigma'} \{ [\langle \sigma | x_{k^+}^+ \rangle \langle x_{k^+}^+ | \sigma' \rangle \\ &\quad + \langle \sigma | x_{k^-}^- \rangle \langle x_{k^-}^- | \sigma' \rangle] \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle \}\end{aligned}\quad (B2)$$

Dabei bedeutet  $x^+$  spin up und  $x^-$  spin down. Diese müssen jedoch nicht auf die z-Achse bezogen sein, sondern können beliebig im Spinraum verteilt sein, mit der Nebenbedingung  $x^+ \perp x^-$ . Entsprechend der Rotation im Spinraum SU(2) kann man dann für allgemeine  $x^+$  und  $x^-$  schreiben:

$$x_{k^+}^+ = \cos\alpha_{k^+} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin\alpha_{k^+} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (B3a)$$

$$x_{K'}^- = \sin \alpha_{K'} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \cos \alpha_{K'} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (B3b)$$

Daraus ergeben sich die folgenden Matrixelemente:

$$\langle \sigma^+ | x^+ \rangle = \cos \alpha \quad (B4a)$$

$$\langle \sigma^- | x^+ \rangle = \sin \alpha \quad (B4b)$$

$$\langle \sigma^+ | x^- \rangle = \sin \alpha \quad (B4c)$$

$$\langle \sigma^- | x^- \rangle = -\cos \alpha \quad (B4d)$$

Durch Einsetzen von (B4a)-(B4d) in den Ausdruck innerhalb der geschweiften Klammer von (B2) und durch Ausführen der Summation über  $\sigma, \sigma'$  erhält man das Resultat, daß eben diese Klammer verschwindet:

$$\sum_{\sigma, \sigma'} [\langle \sigma | x^+ \rangle \langle x^+ | \sigma' \rangle + \langle \sigma | x^- \rangle \langle x^- | \sigma' \rangle] \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle = 0 \quad (B5)$$

Daraus folgt dann

$$\vec{S}_q(\vec{r}, \vec{r}') = 0 \quad (B6)$$

## Verzeichnis der Abbildungen

- Abb. 1: Kollektive Masse berechnet in der Linear Response Theorie als Funktion von  $\delta q$ . Die horizontale Linie zeigt die entsprechende ATDHF-Masse.
- Abb. 2: Verteilung des Stomdichtevektors  $\vec{j}(\vec{r})$  bei drei verschiedenen Entfernungen der Fragmente zusammen mit den Dichtelinien von 1, 10 und 70 % der maximalen Dichte.
- Abb. 3: Klassisches Potential  $V(R)$  des  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ -Systems berechnet mit den Wechselwirkungen SKII, SKIII, SKa und SKM\*.
- Abb. 4: Kollektive Masse  $M(R)$  des  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  Systems berechnet mit den Wechselwirkungen SKII, SKIII, SKa und SKM\*.
- Abb. 5: Astrophysikalischer S-Faktor für die Subbarrierenfusion  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O} \rightarrow ^{32}\text{S}$  berechnet mit SKII, SKIII, SKa und SKM\*. Die experimentellen Werte stammen von Thomas et al.<sup>49)</sup>.
- Abb. 6: Astrophysikalischer S-Faktor für die Subbarrierenfusion  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O} \rightarrow ^{32}\text{S}$  berechnet mit SKM\* und mit einer modifizierten BKN-Kraft. Die experimentellen Daten sind von Thomas et al.<sup>49)</sup>, Spinka und Winkler<sup>50)</sup>, Hulke et al.<sup>51)</sup> sowie Wu und Barnes<sup>52)</sup>.
- Abb. 7: Klassisches Potential  $V(R)$  entlang des Gradienten-Pfades für das System  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  berechnet mit SKM\*.
- Abb. 8: ATDHF- und GCM-Masse entlang des Gradienten-Pfades für das System  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  berechnet mit SKM\*.

Abb. 9: Quantenkorrigiertes Potential  $V(\bar{R})-Z(\bar{R})$  als Funktion der reduzierten Koordinate für das System  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca}$  berechnet mit SKM\*.

Abb. 10: Subbarrierenfusionsquerschnitt als Funktion der Schwerpunktsenergie  $E_{c.m.}$  für das System  $^{40}\text{Ca}+^{40}\text{Ca} \rightarrow ^{80}\text{Zr}$ . Die experimentellen Daten sind von Aljuwair et al.<sup>53)</sup>.

Abb. 11: Axialsymmetrische Konfiguration des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$ .

Abb. 12: Klassisches Potential  $V(\bar{R})$  als Funktion der reduzierten Koordinate  $\bar{R}$  für die Reaktion  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne} \rightarrow ^{32}\text{S}$  berechnet in quantisierter ATDHF-Theorie und in der Sudden Näherung unter Verwendung der SKIII Wechselwirkung. Das ATDHF-Potential des Systems  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O} \rightarrow ^{32}\text{S}$  ist ebenfalls eingezeichnet. Für einen direkten Vergleich ist es mit der kollektiven Masse des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  skaliert und anschließend verschoben worden, derart, daß die HF-Punkte in dem gewählten Koordinatensystem übereinstimmen.

Abb. 13: Vergleich zwischen den Linien gleicher Dichte von 1, 10, 30, 50, 70, 90 % der jeweiligen maximalen Dichte bei drei verschiedenen Entfernungen. Die Linien von 30 und 70 % sind verstärkt gezeichnet. Die linke Seite enthält die Resultate für quantisiertes ATDHF, die rechte Seite diejenigen für die Sudden Näherung.

Abb. 14: Astrophysikalischer S-Faktor für die Subbarrierenfusion des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne} \rightarrow ^{32}\text{S}$  berechnet in quantisierter ATDHF-Theorie und in der Sudden Näherung. Die experimentellen Resultate sind von Hulke et al.<sup>51)</sup>.



Abb. 15: Klassisches Potential  $V(R)$  des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  berechnet mit der Wechselwirkung SKIII entlang des ATDHF-Pfades (durchgezogene Linie) und entlang des GRAD-Pfades (gestrichelte Linie). Die gepunktete Linie zeigt das Potential  $V(R)$  für das System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  berechnet mit SKIII.

Abb. 16: Klassisches Potential  $V(R)$  des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  berechnet mit der Wechselwirkung SKV entlang des ATDHF-Pfades (durchgezogene Linie) und entlang des GRAD-Pfades (gestrichelte Linie).

Abb. 17: Kollektive Masse des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  berechnet mit der SKIII Wechselwirkung in ATDHF- und GCM-Näherung entlang des ATDHF- und des GRAD-Pfades.

Abb. 18: Wie Abb. 17, nur für SKV.

Abb. 19: Verhältnis von ATDHF- zu GCM-Masse für die kollektive Masse  $M$  (durchgezogene Linie), die Translationsmasse in  $z$ -Richtung,  $M_z$  (gestrichelte Linie), und für das Trägheitsmoment  $\theta_x$  (gepunktete Linie), berechnet für das System  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  unter Verwendung der SKIII Wechselwirkung. Die kollektive Masse  $M$  ist längs des GRAD-Pfades berechnet worden,  $M_z$  und  $\theta_x$  längs des ATDHF-Pfades.

Abb. 20: Wie Abb. 19, nur für SKV.

Abb. 21: Quantenkorrigiertes Potential  $V(\bar{R})-Z(\bar{R})$  als Funktion der reduzierten Koordinate  $\bar{R}$  berechnet für das System  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}$  mit der Wechselwirkung SKIII.

Abb. 22: Wie Abb. 21, nur für SKV.

Abb. 23: Klassisches Potential  $V(R)$  für das System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  berechnet mit der Wechselwirkung SKM\* entlang des ATDHF-Pfades (durchgezogene Linie) und entlang des GRAD-Pfades (gepunktete Linie).

Abb. 24: Kollektive Masse für das System  $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$  berechnet mit SKM\*. ATDHF-Masse entlang des ATDHF-Pfades (durchgezogene Linie), ATDHF-Masse entlang des GRAD-Pfades (gestrichelte Linie) und GCM-Masse entlang des GRAD-Pfades (gepunktete Linie).

Abb. 25: Astrophysikalischer S-Faktor für die Subbarrierenfusion des Systems  $^{12}\text{C}+^{20}\text{Ne}+^{32}\text{S}$  berechnet mit SKIII. Die verschiedenen Kombinationen von Pfad- und Massenberechnungsmethoden sowie die entsprechenden Linientypen können von Abb. 21 entnommen werden. Die experimentellen Werte sind von Hulke et al.<sup>51)</sup>.

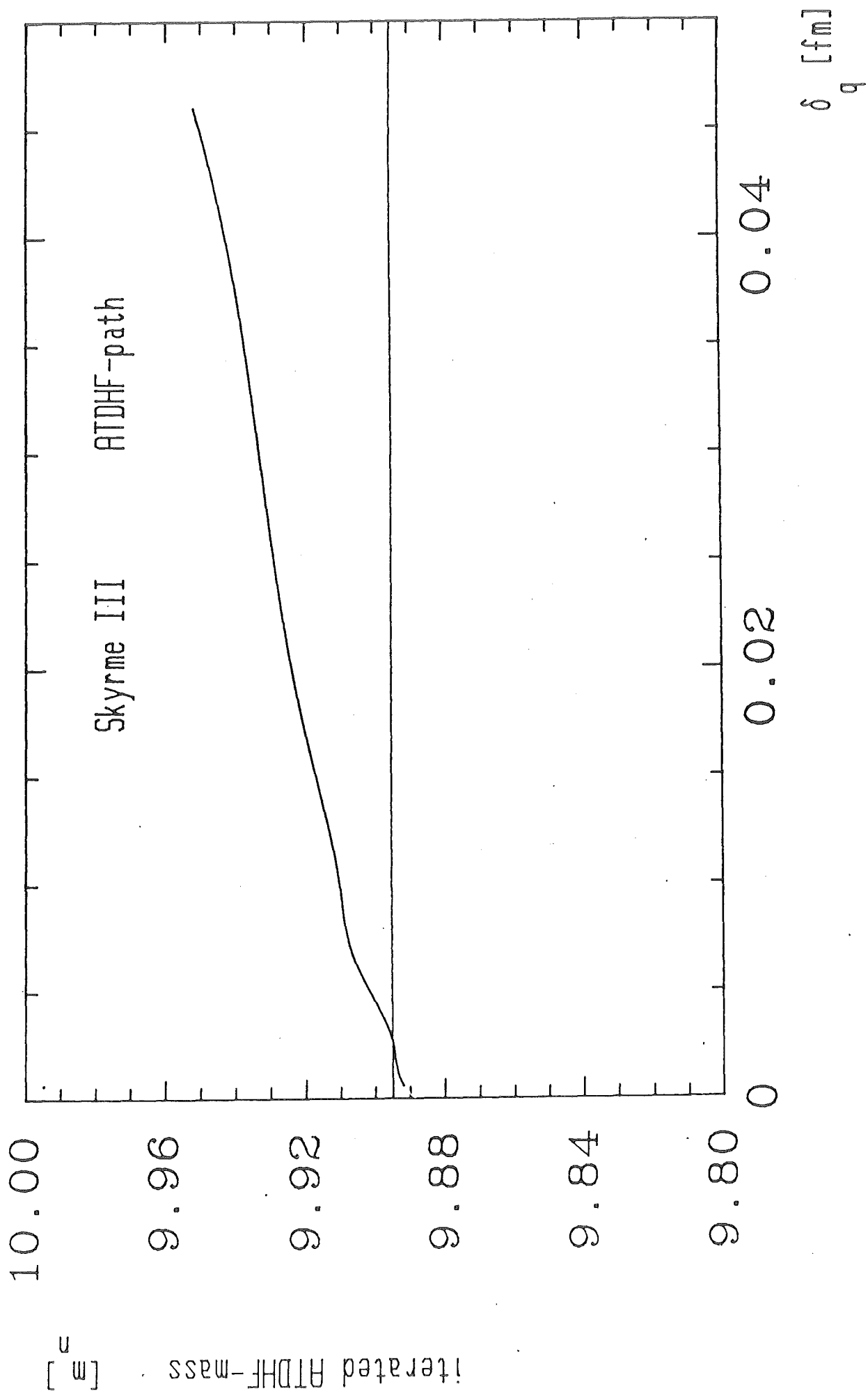
Abb. 26: Wie Abb. 25, nur für SKV.

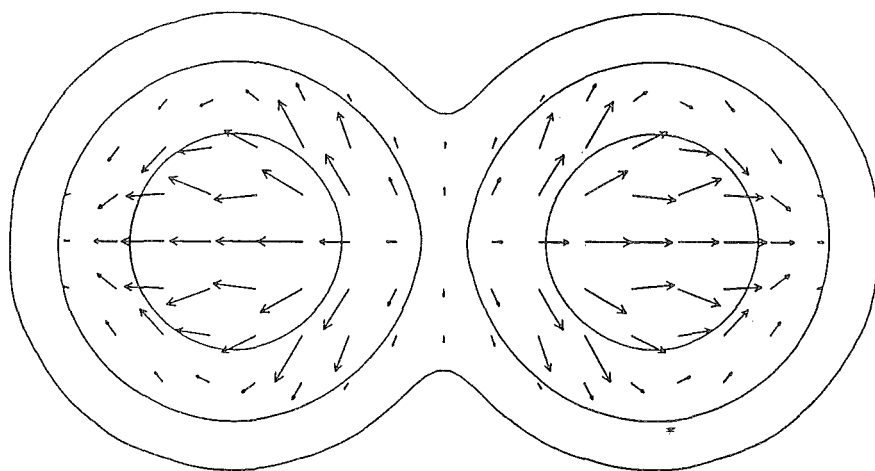
## Literaturverzeichnis

- 1) P.A.M. Dirac, Proc. Cambridge Phil. Soc. 26 (1930) 376
- 2) P. Bonche, S. Koonin und J.W. Negele, Phys. Rev. C13 (1976) 1226
- 3) P. Bonche, R. Grammaticos und S. Koonin, Phys. Rev. C17 (1978) 1700
- 4) A. Dhar und B. Nilsson, Phys. Lett. 77B (1978) 50
- 5) F. Villars, Nucl. Phys. A285 (1977) 269
- 6) M. Baranger und M. Vénéroni, Ann. Phys. 114 (1978) 123
- 7) T. Marumori, Prog. Theor. Phys. 57 (1977) 112
- 8) H. Reinhardt, Nucl. Phys. A346 (1980) 1
- 9) S. Levit, J. Negele und Z. Paltiel, Phys. Rev. C21 (1980) 1603
- 10) M. Kuratsuji und T. Suzuki, Phys. Lett. B92 (1980) 19
- 11) J.P. Blaizot und M. Orland, J. Phys. (Paris) 41 (1980) L43
- 12) K. Goeke, P.-G. Reinhard und H. Reinhardt, Phys. Lett. B118 (1982) 1
- 13) D.J. Rowe und R. Bassermann, Canad. J. Phys. 54 (1976) 1941
- 14) G. Holzwarth und T. Yukawa, Nucl. Phys. A219 (1974) 125
- 15) P. Ring, P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem, Springer Verlag (1980)
- 16) H. Friedrich, Phys. Rep. 74 (1981) 209
- 17) K. Goeke und P.-G. Reinhard, Ann. Phys. 112 (1978) 328
- 18) P.-G. Reinhard und K. Goeke, Phys. Rev. C20 (1979) 1546
- 19) P.-G. Reinhard und K. Goeke, Nucl. Phys. A312 (1978) 121
- 20) K. Goeke und P.-G. Reinhard, Ann. Phys. 124 (1980) 249
- 21) P.-G. Reinhard und K. Goeke, Phys. Lett. B69 (1977) 17
- 22) H.R. Fiebig und A. Weiguny, Z. Phys. A279 (1976) 275
- 23) H. Friedrich, H. Hüsken und A. Weiguny, Nucl. Phys. A220 (1974) 125
- 24) E. Deumens, Dissertation, Antwerpen (1982)
- 25) K. Goeke, F. Grümmer, P.-G. Reinhard, Ann. Phys. 150 (1983) 504

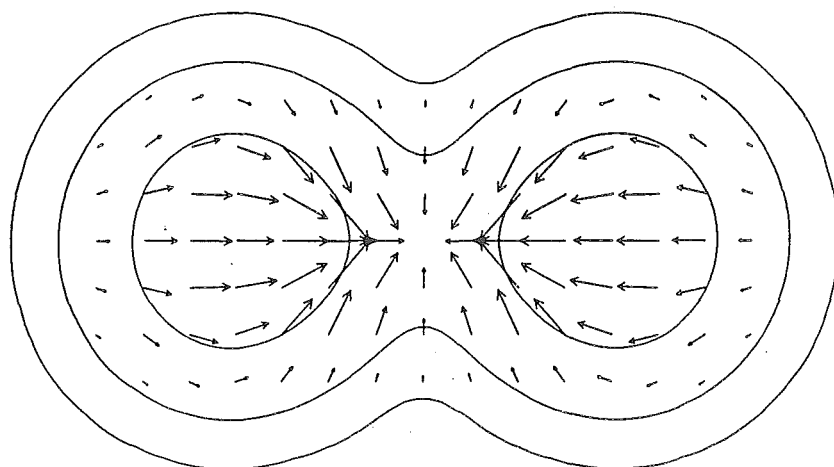
- 26) D. Provoost, F. Grümmer, K. Goeke, P.-G. Reinhard, Nucl. Phys. A431 (1984) 139
- 27) P.-G. Reinhard, J. Friedrich, K. Goeke, F. Grümmer, D.H.E. Gross, Phys. Rev. C30 (1984) 878
- 28) T.H.R. Skyrme, Nucl. Phys. 9 (1959) 615
- 29) R.A. Broglia, C.H. Dasso, S. Landowne, G. Pollarolo, Phys. Lett. 133B (1983) 34
- 30) S. Landowne, S.C. Pieper, Phys. Rev. C29 (1984) 29
- 31) D.L. Hill, J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102;  
J.J. Griffin, J.A. Wheeler, Phys. Rev. 108 (1957) 311
- 32) R.E. Peierls, J. Yoccoz, Proc. Phys. Soc. (London) A70 (1957) 381
- 33) D.J. Thouless, J.G. Valatin, Nucl. Phys. 31 (1962) 211
- 34) K. Goeke, F. Grümmer und P.-G. Reinhard, Proceedings, Mathematical and Computational Methods in Nuclear Physics, Granada, Spanien (1983)
- 35) Dimitrov, B. Slavov, K. Goeke, F. Grümmer, P.-G. Reinhard, preprint (1985)
- 36) K. Goeke, P.-G. Reinhard und D.J. Rowe, Nucl. Phys. A359 (1981) 408
- 37) D.R. Inglis, Phys. Rev. 96 (1954) 1059
- 38) S.T. Belyaev, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk 31 (1959);  
S.T. Belyaev, Nucl. Phys. 24 (1961) 322
- 39) D. Vautherin, D.M. Brink, Phys. Rev. C5 (1972) 626
- 40) Y.M. Engel, D.M. Brink, K. Goeke, S.J. Krieger, D. Vautherin, Nucl. Phys. A249 (1975) 215
- 41) M. Beiner, H. Flocard, Nguyen Van Giai, P. Quentin, Nucl. Phys. A238 (1975) 29
- 42) H.S. Köhler, Nucl. Phys. A258 (1976) 301
- 43) W.D. Myers, W.J. Swiatecki, Ann. Phys. 55 (1969) 395 und Ann. Phys. 84 (1974) 186

- 44) J. Bartel, P. Quentin, M. Brack, C. Guet, H.-B. Hakansson, Nucl. Phys. A386 (1982) 79
- 45) P.-G. Reinhard, F. Grümmer, K. Goeke, Z. Phys. A317 (1984) 339
- 46) P.-G. Reinhard, private Mitteilung
- 47) P.-G. Reinhard, R.Y. Cusson, Nucl. Phys. A378 (1982) 418
- 48) R. Gissler, K. Goeke und F. Grümmer, preprint Jülich (1985)
- 49) J. Thomas, Y.T. Chen, S. Hinds, K. Langanke, D. Meredith, M. Olson, C.A. Barnes, Phys. Rev. C31 (1985) 1980
- 50) H. Spinka, H. Winkler, Nucl. Phys. A233 (1974) 456
- 51) G. Hulke, C. Rolfs, H.P. Trautvetter, Z. Phys. A297 (1980) 161
- 52) S.-C. Wu, C.A. Barnes, Nucl. Phys. A422 (1984) 373
- 53) H.A. Aljuwair et al., Phys. Rev. C30 (1984) 1223
- 54) R.G. Stokstad et al., Phys. Rev. Lett. 41 (1978) 465
- 55) M. Beckerman et al., Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 1472
- 56) W. Reisdorf et al., Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 1811
- 57) L.C. Vaz, J.M. Alexander und G.R. Satchler, Phys. Rep. 69 (1981) 373
- 58) J.G. Keller et al., Phys. Rev. C29 (1984) 1569
- 59) J.G. Keller et al., Prov. XXII Int. Winter Meeting on Nuclear Physics, Bormio, Italien, Januar 1984, p. 147
- 60) D. Glas und U. Mosel, Phys. Lett. 49B (1974) 301; Nucl. Phys. A264 (1984) 181
- 61) W.. Cassing, Nucl. Phys. A433 (1985) 479
- 62) L. Landau, Z. Sow. 2 (1932) 46
- 63) C. Zener, Proc. Roy. Soc. A137 (1932) 696
- 64) W. Cassing, GSI Scientific Report (1983) p. 113
- 65) R. Gissler, D. Provoost, F. Grümmer und K. Goeke, preprint Jülich (1985)
- 66) H. Friedrich, L.F. Canto, Nucl. Phys. A291 (1977) 249
- 67) R. Gissler, K. Goeke und F. Grümmer, preprint Jülich (1985)

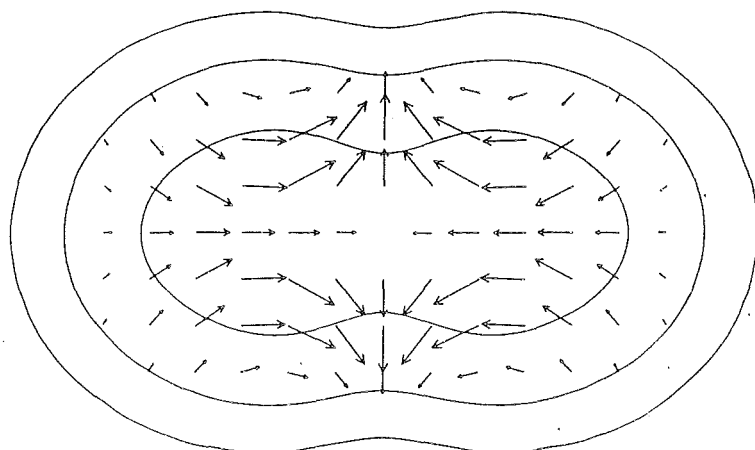




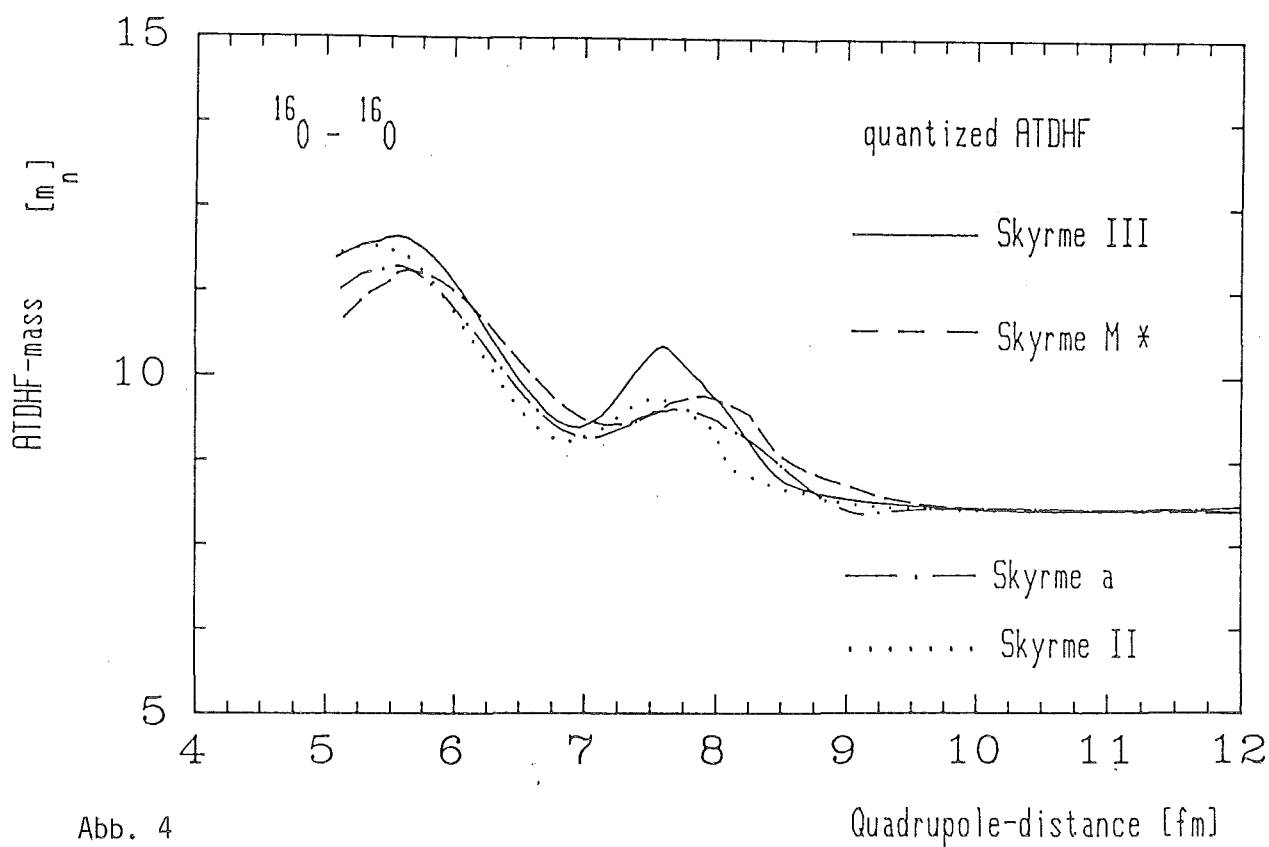
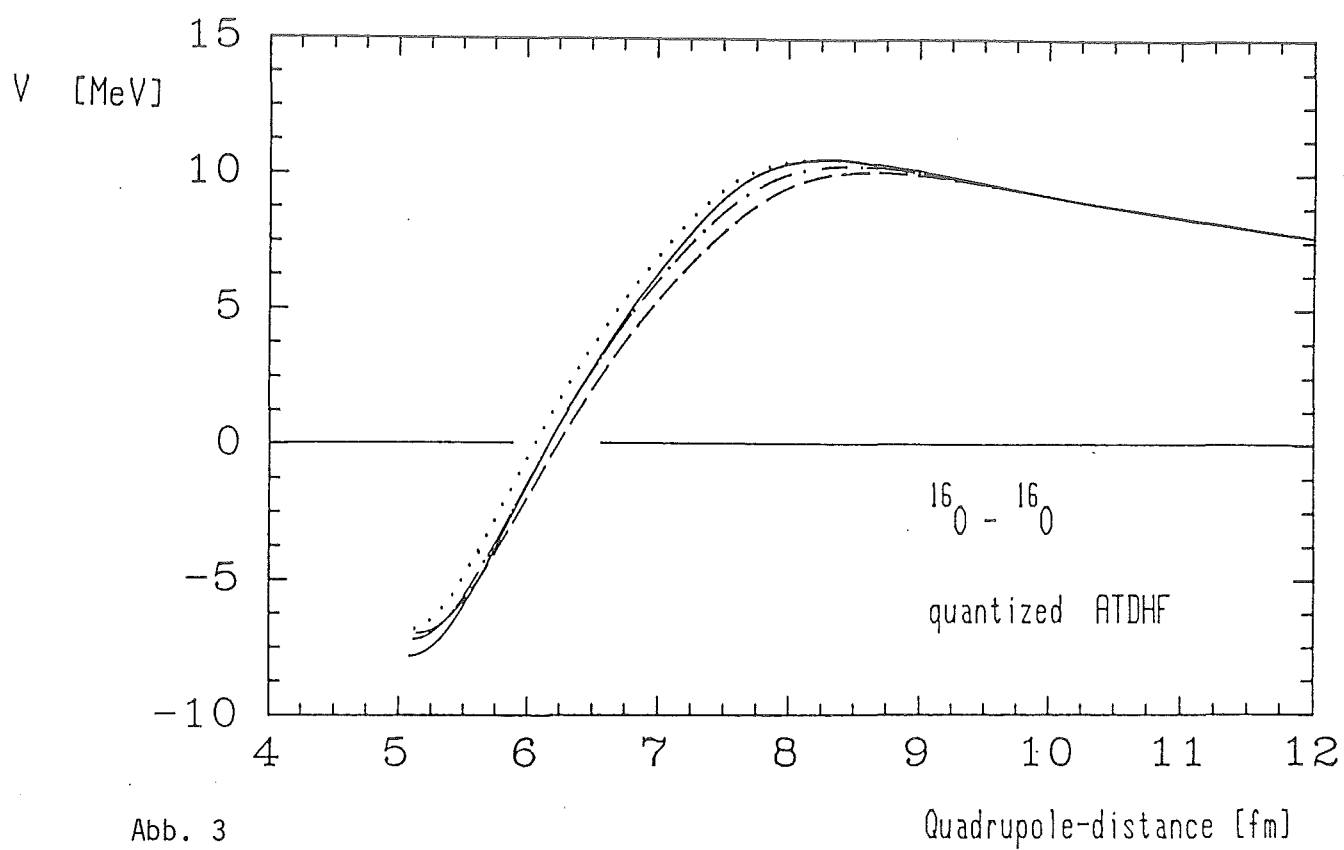
$R = 8.93 \text{ fm}$



$R = 8.00 \text{ fm}$



$R = 5.42 \text{ fm}$





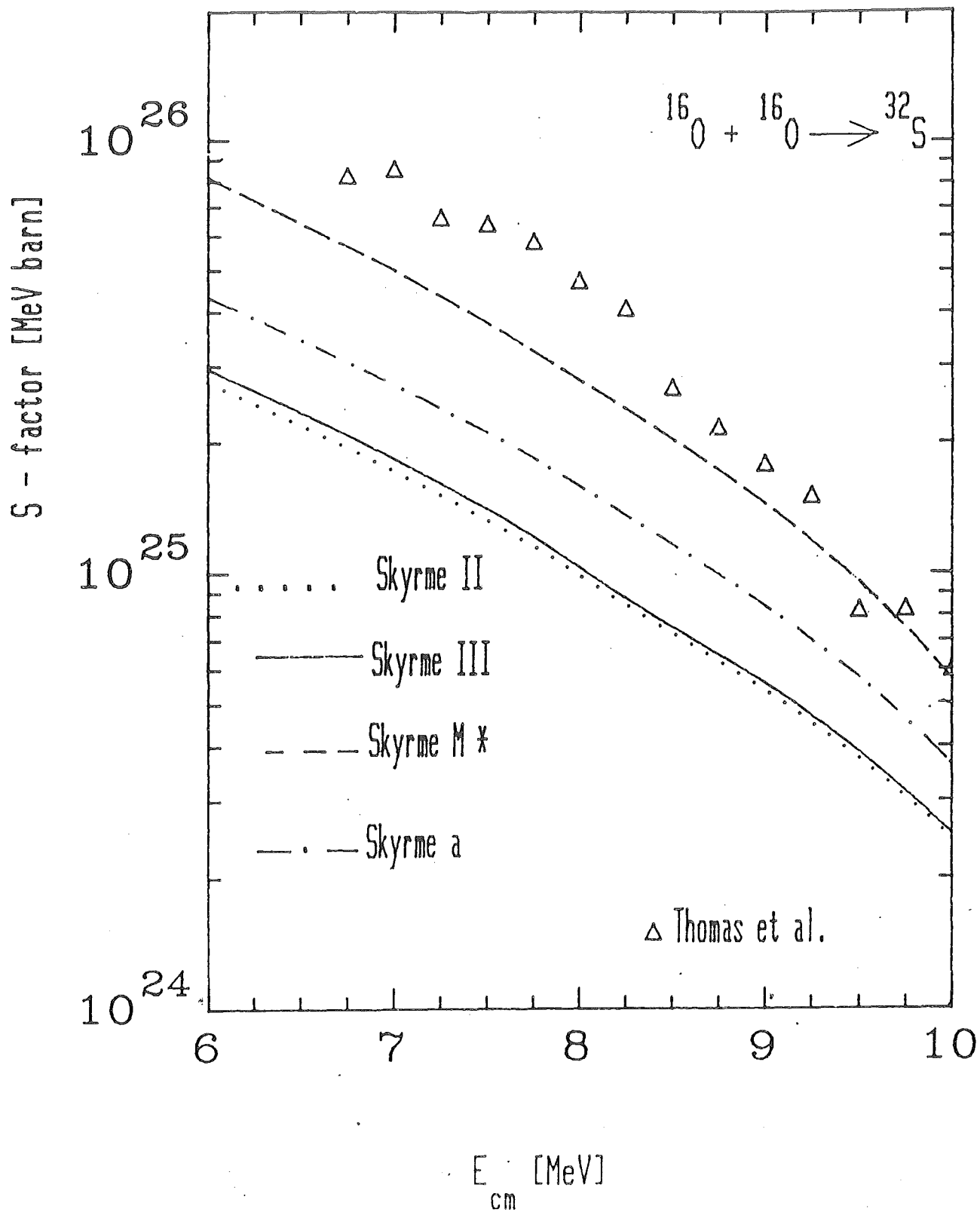


Abb. 5

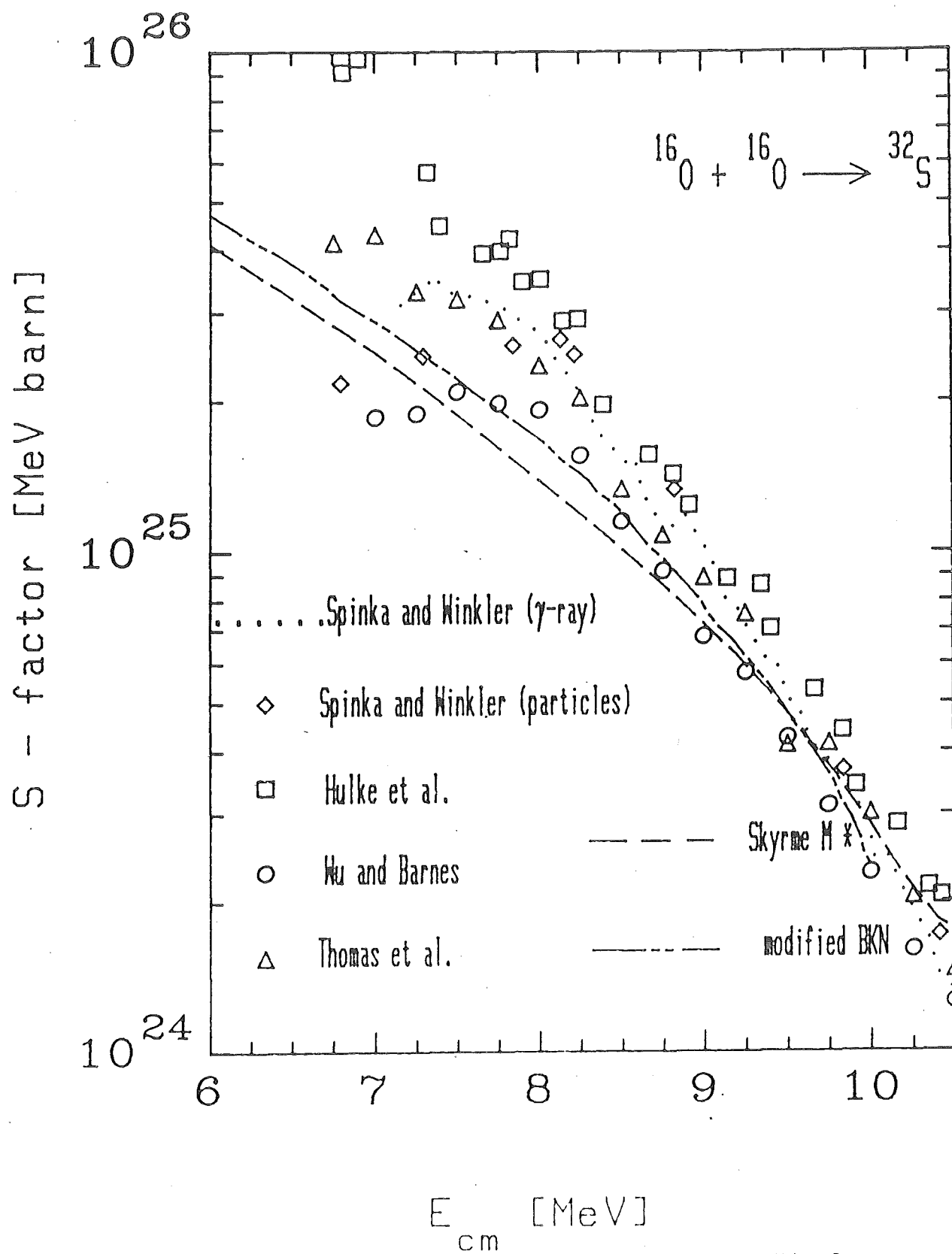
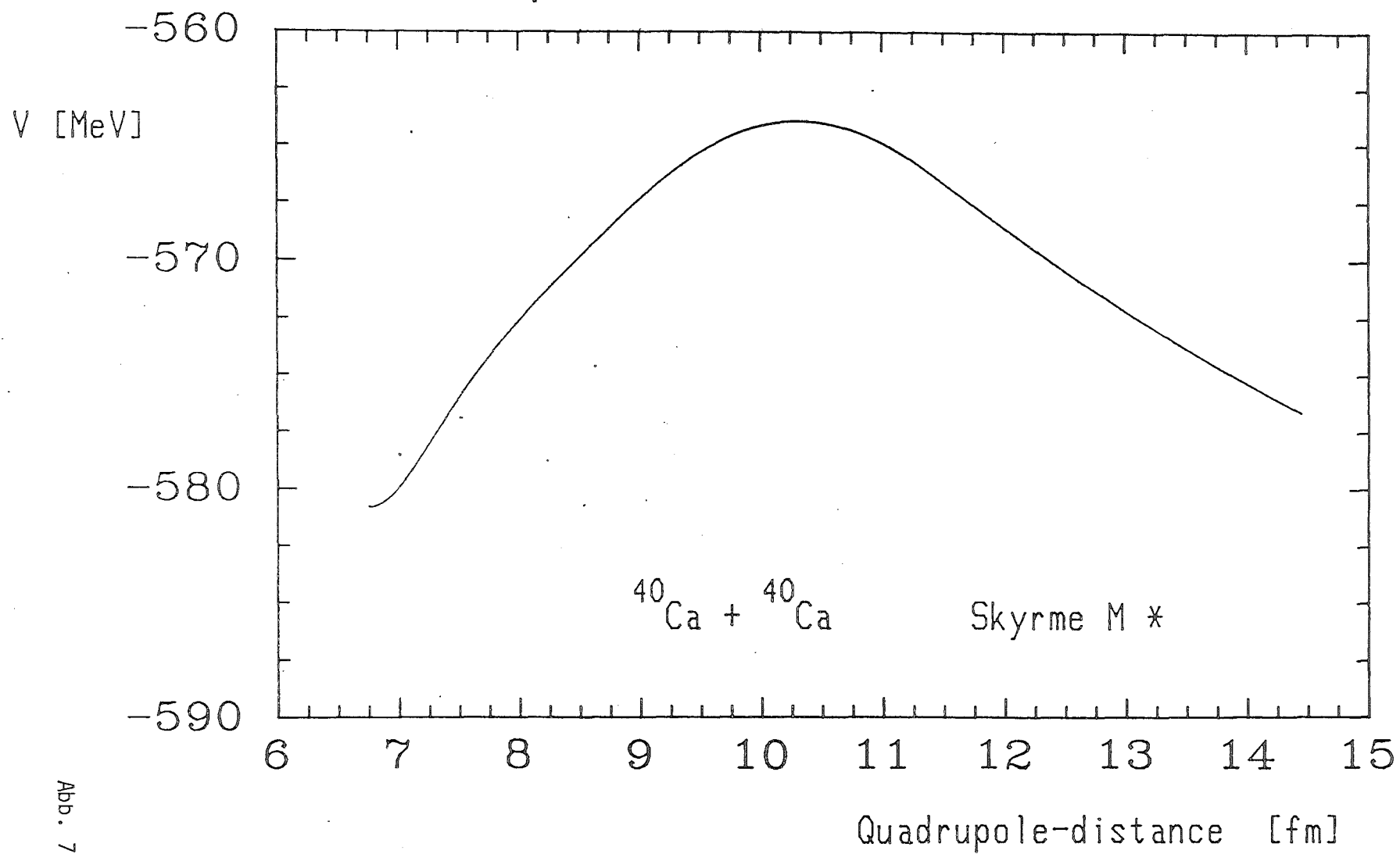


Abb. 6



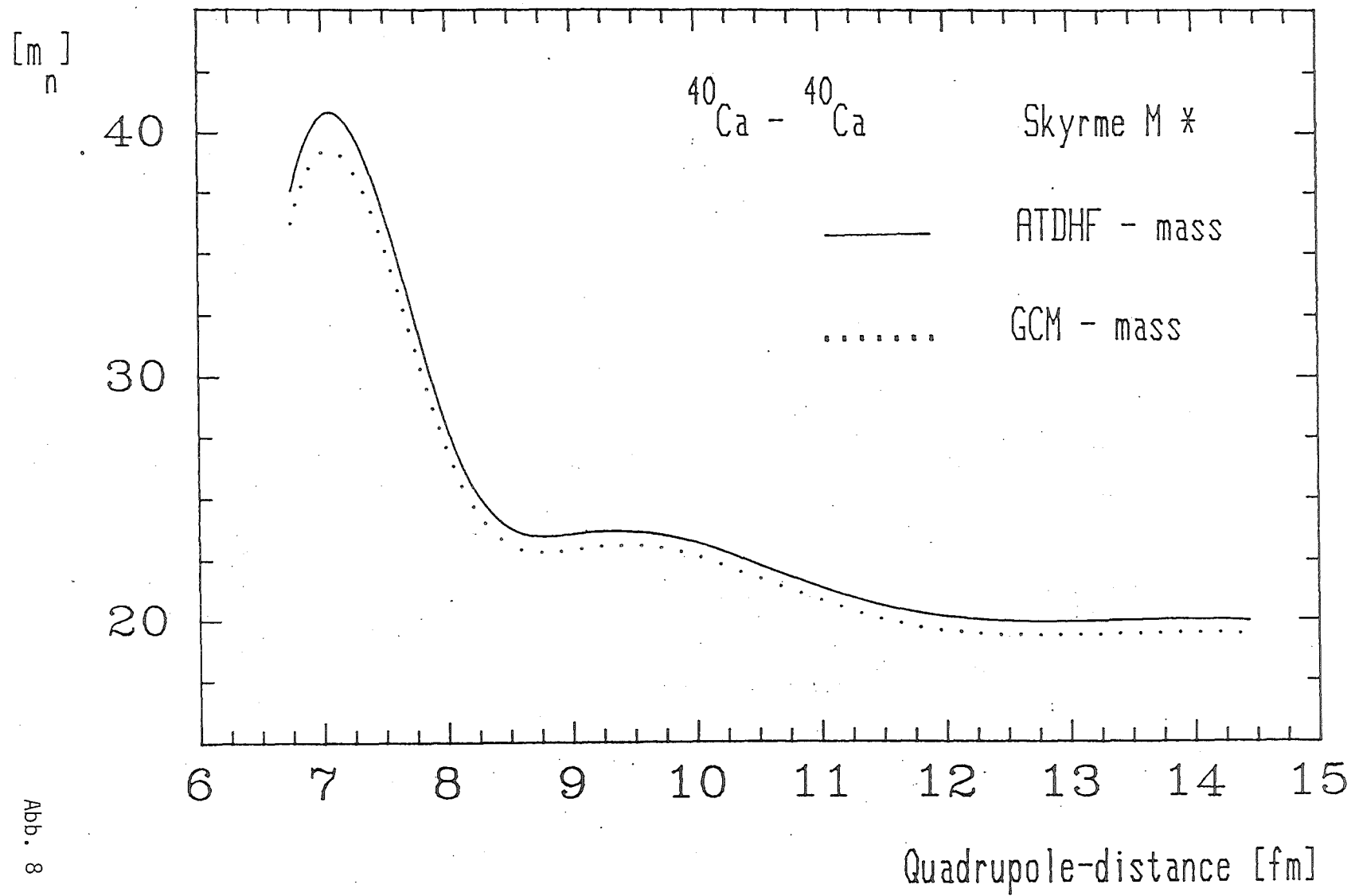
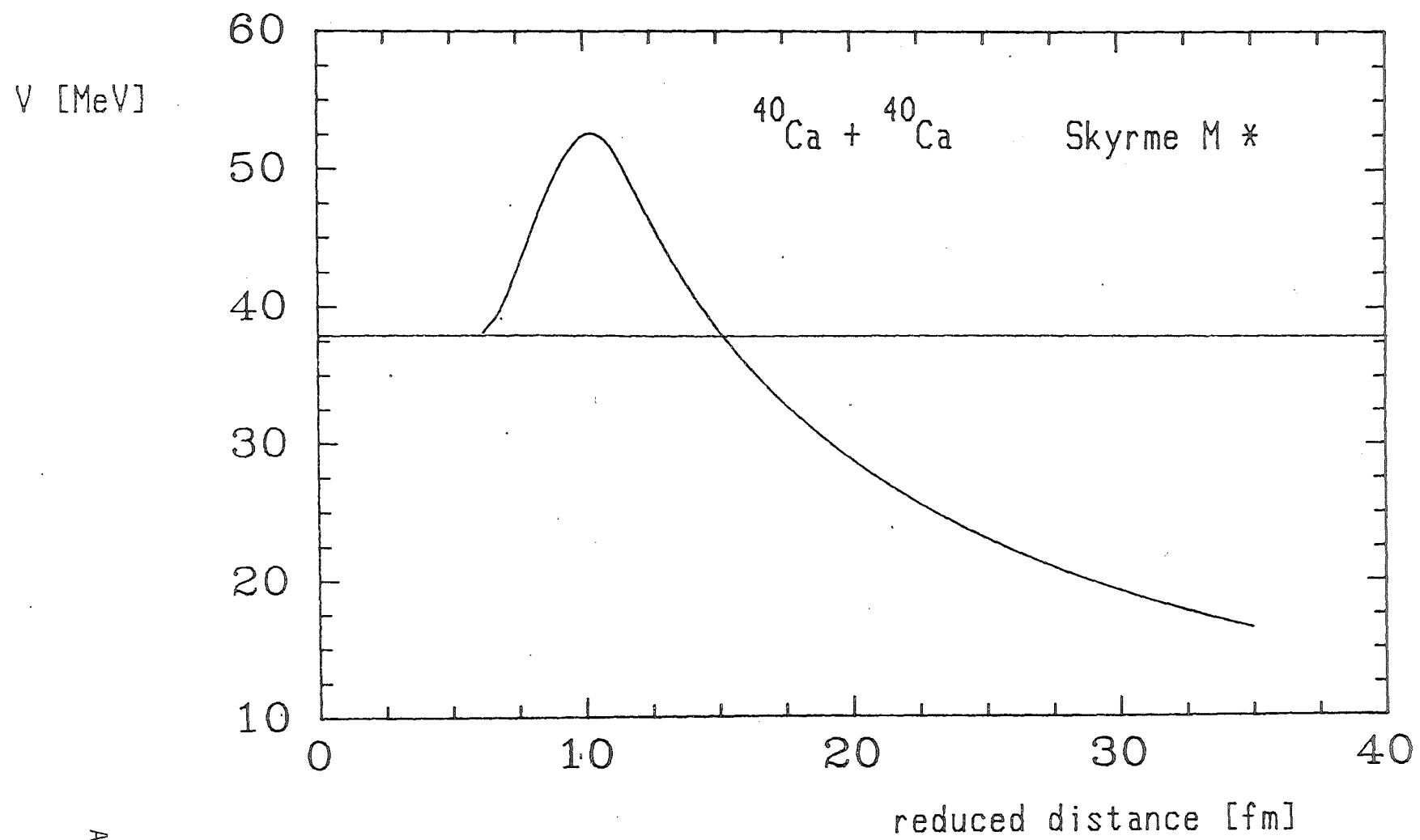


Abb. 8



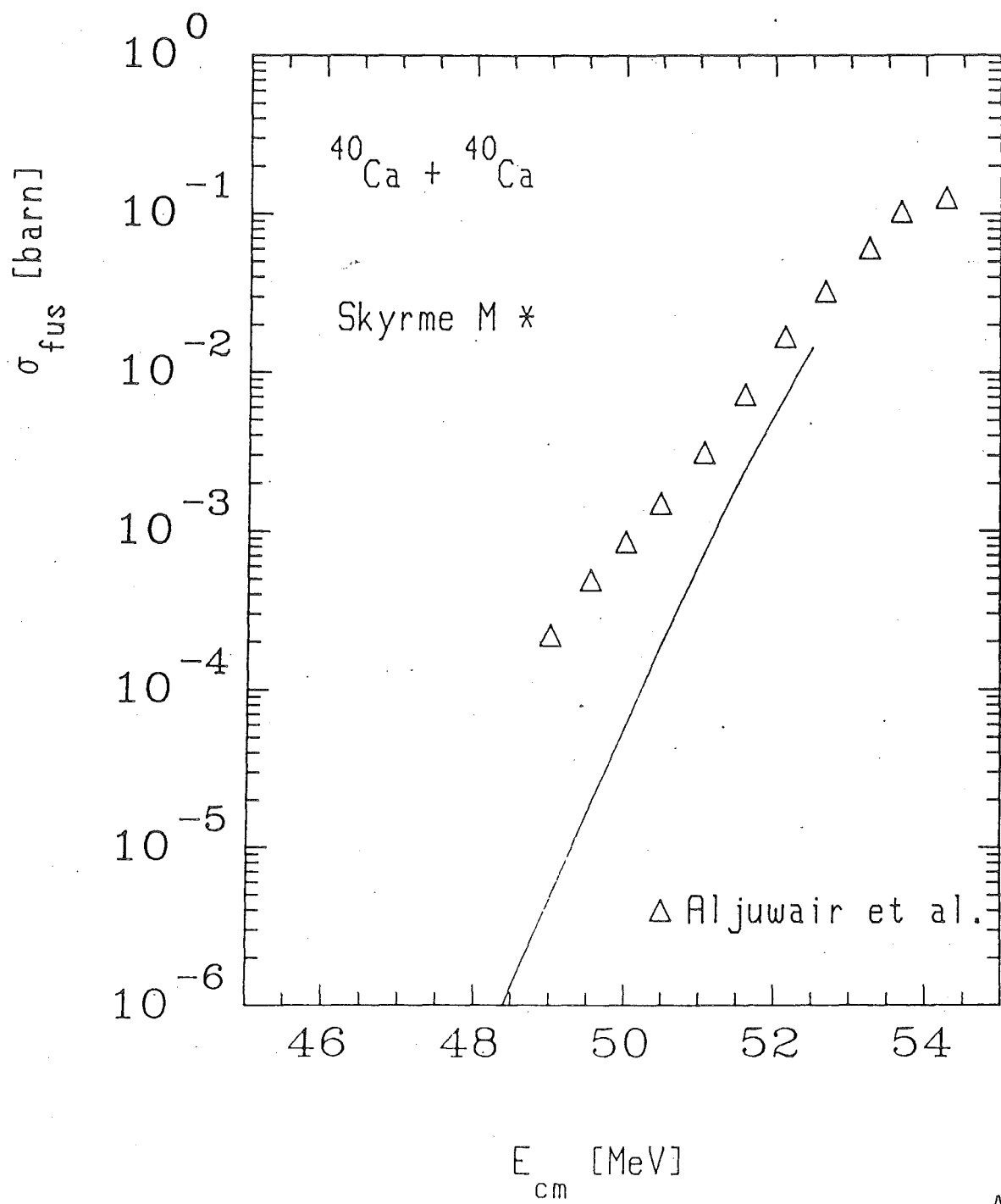


Abb. 10

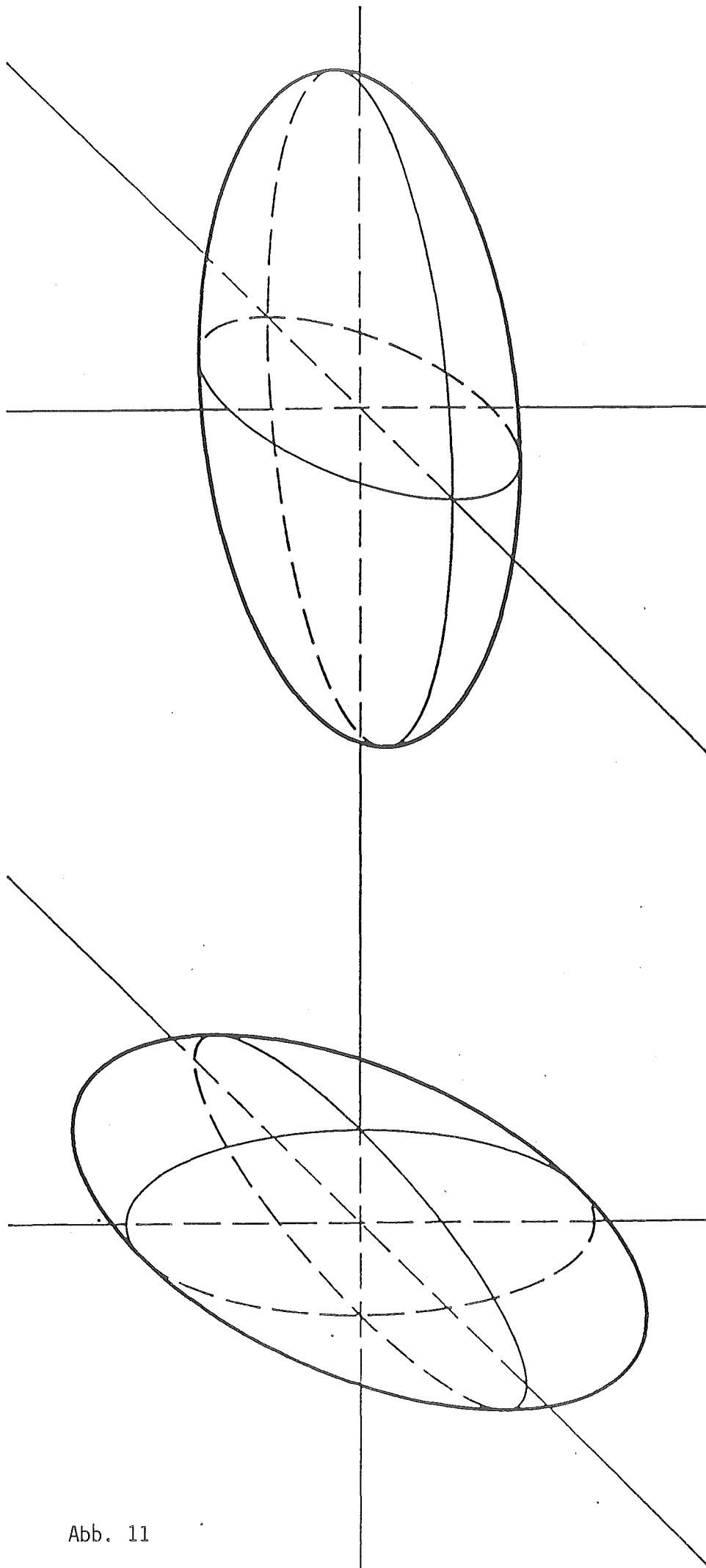
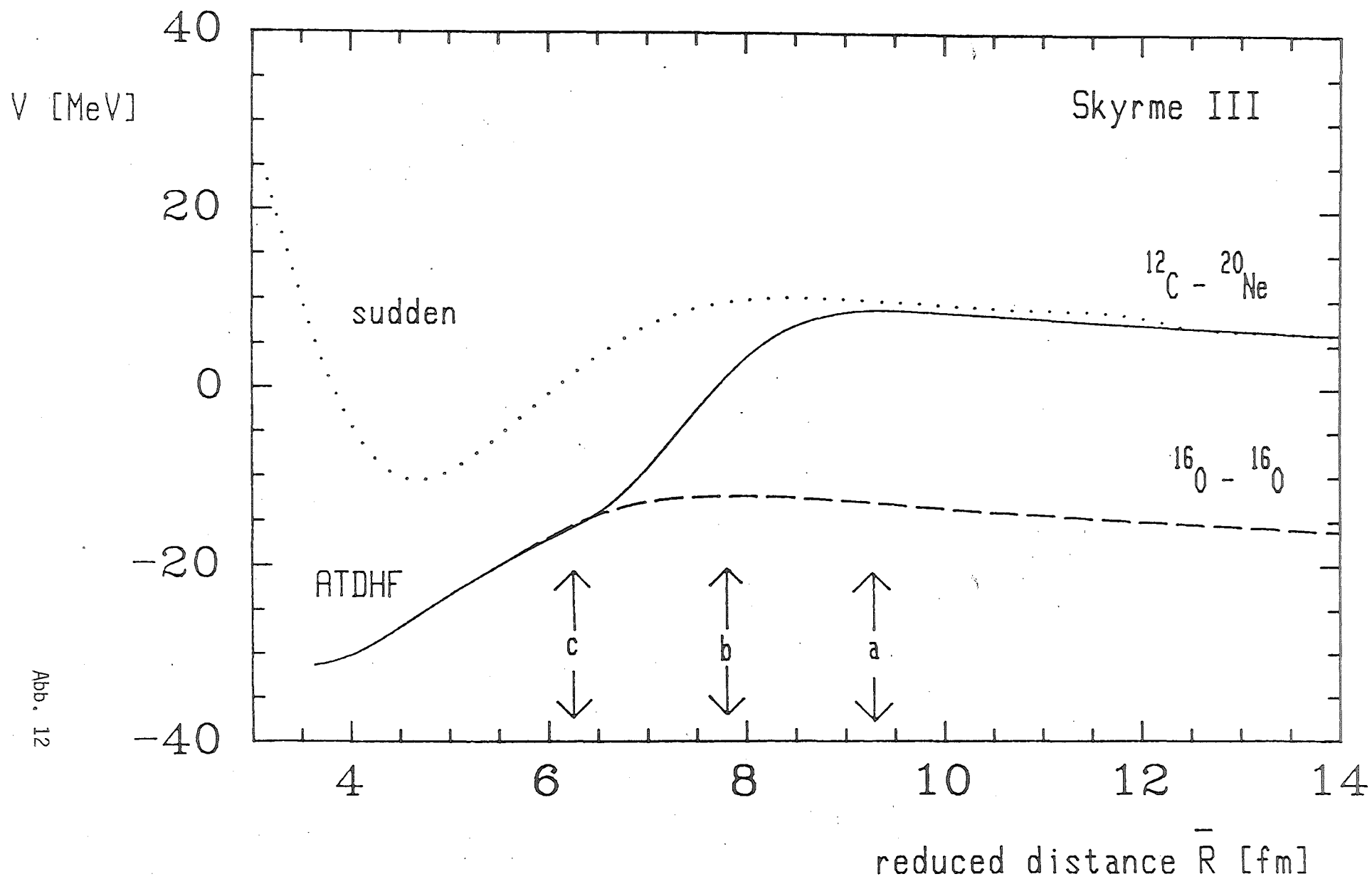


Abb. 11





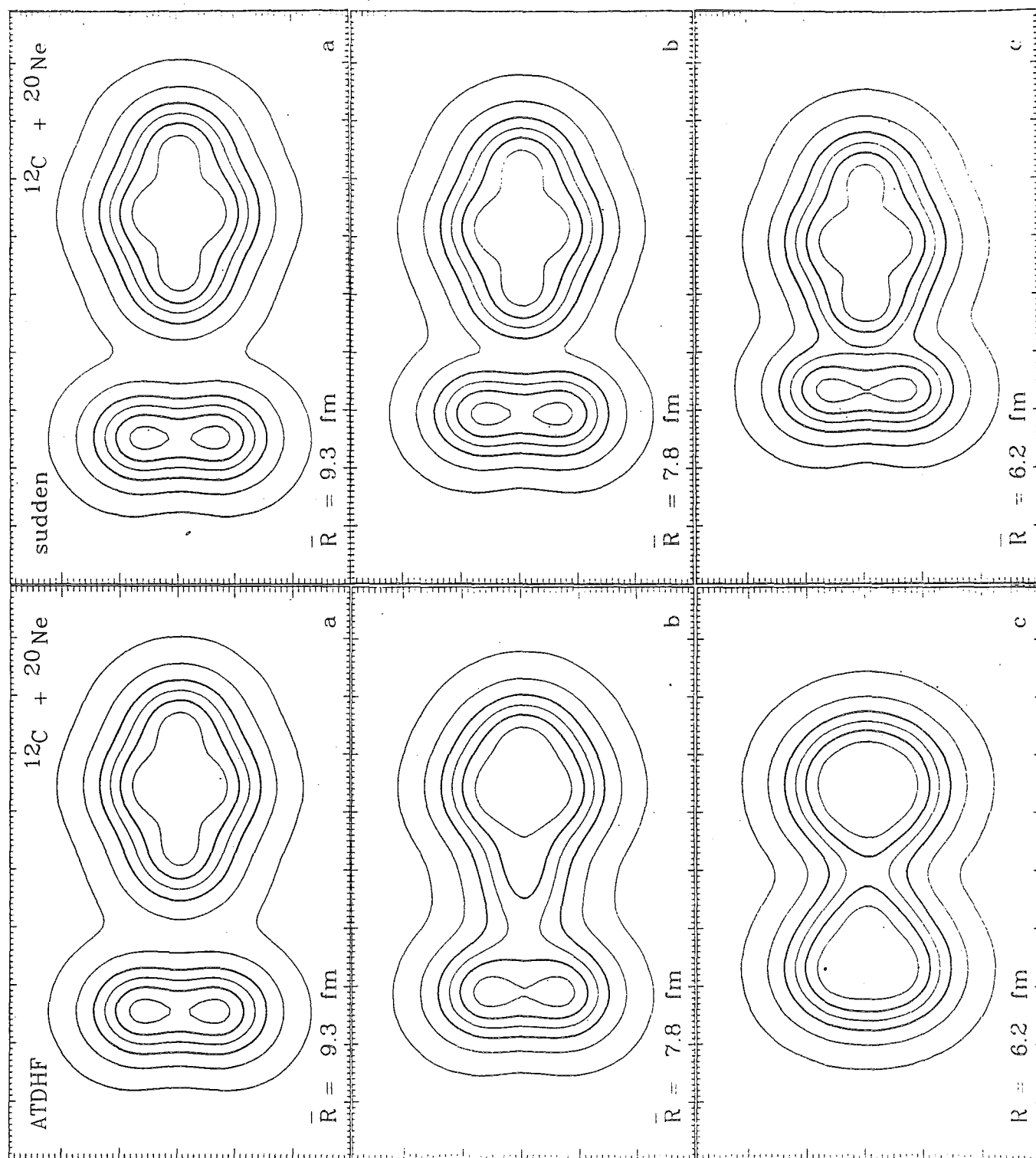
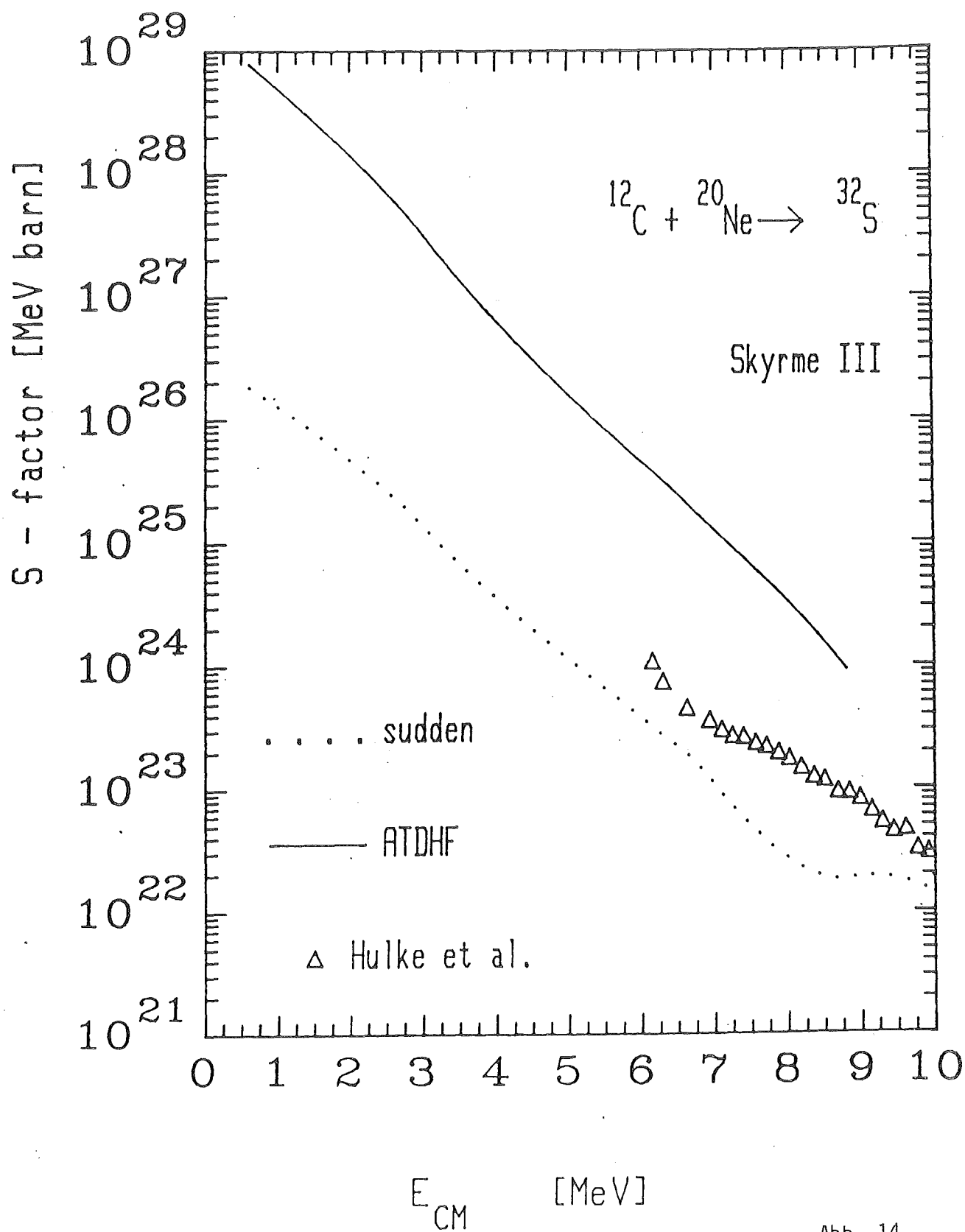
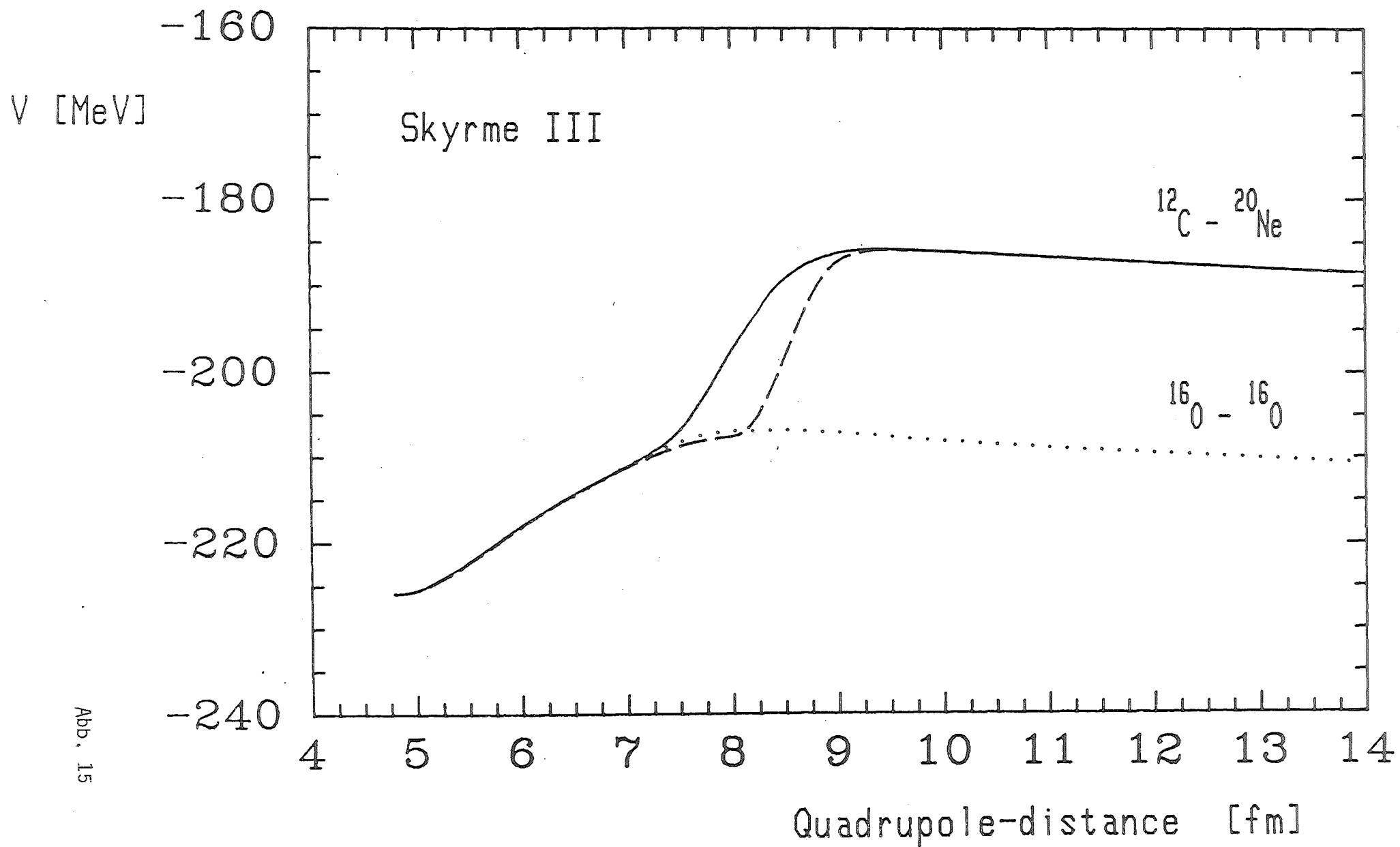
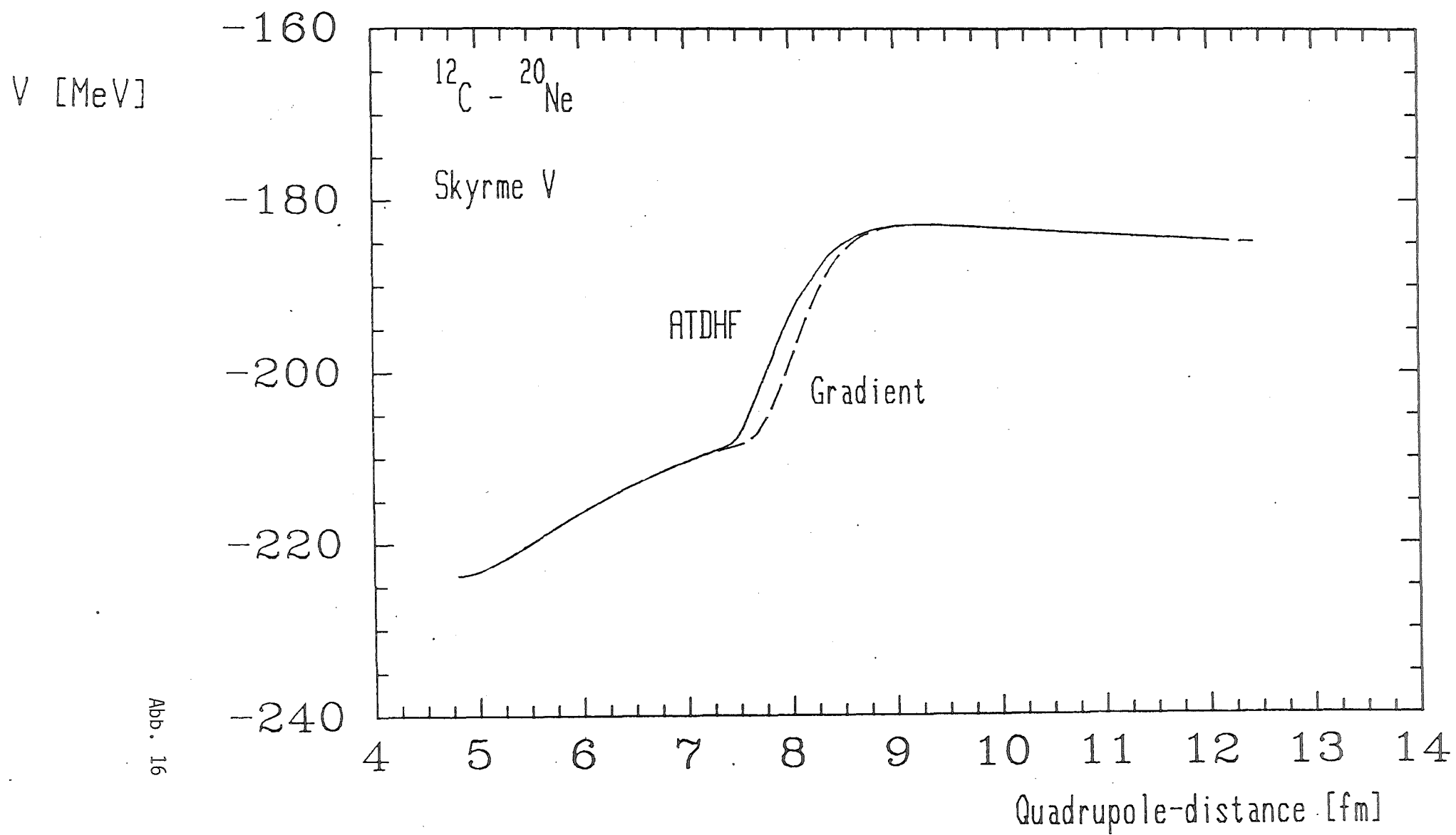
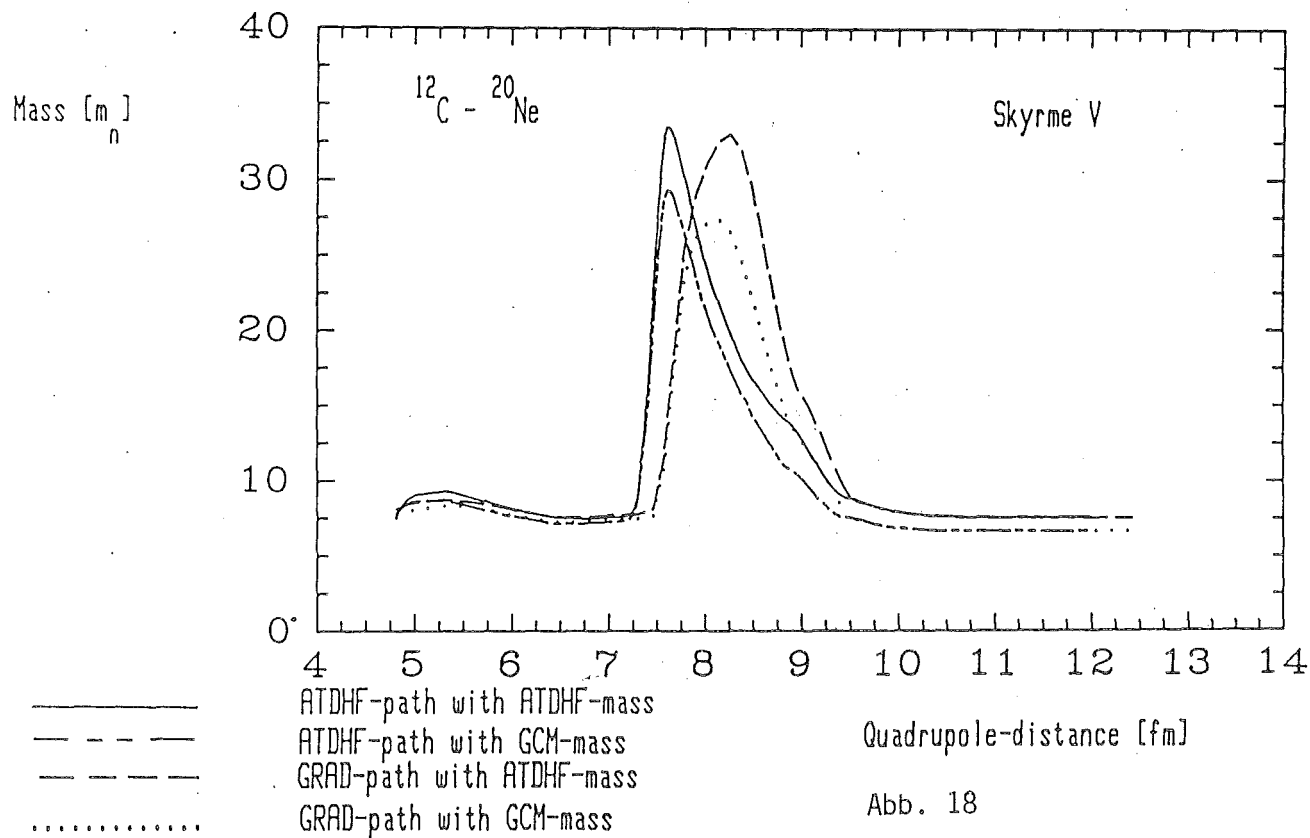
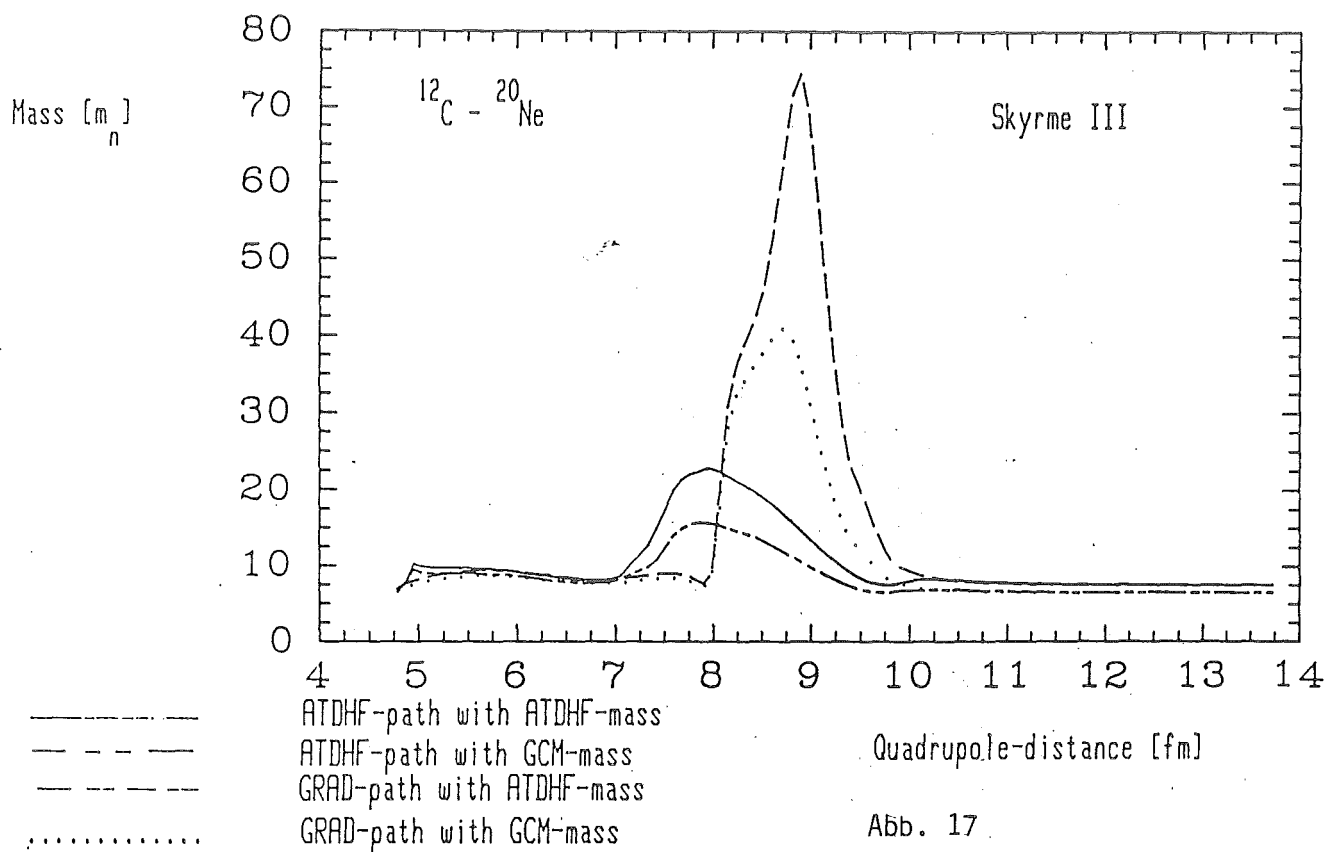


Abb. 13









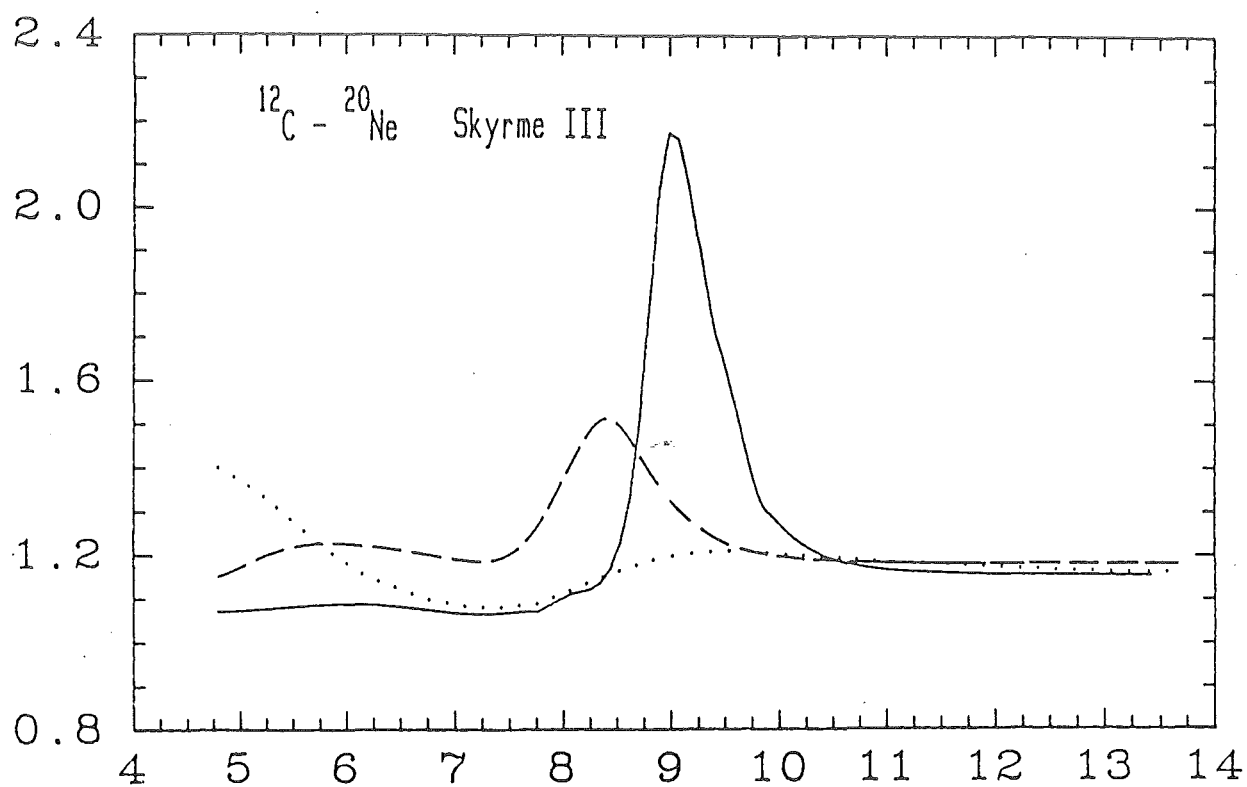


Abb. 19

Quadrupole-distance [fm]

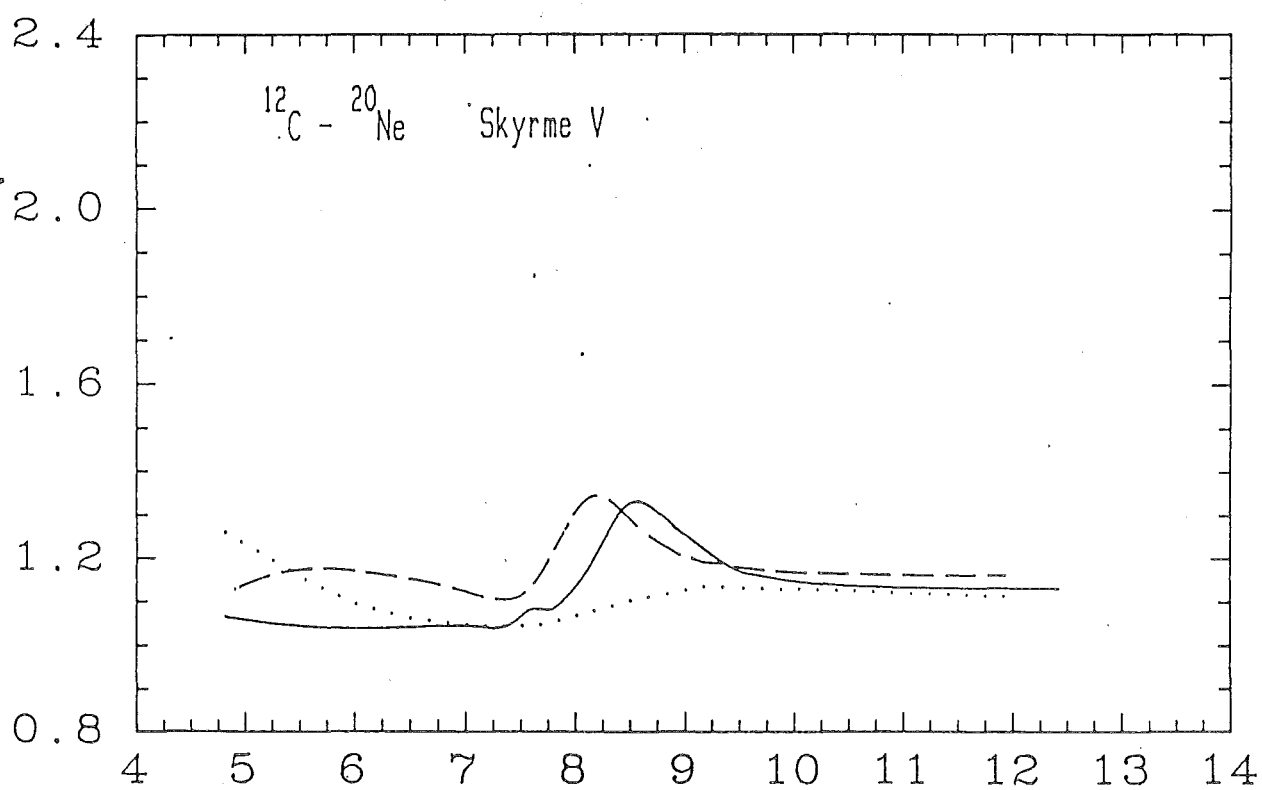
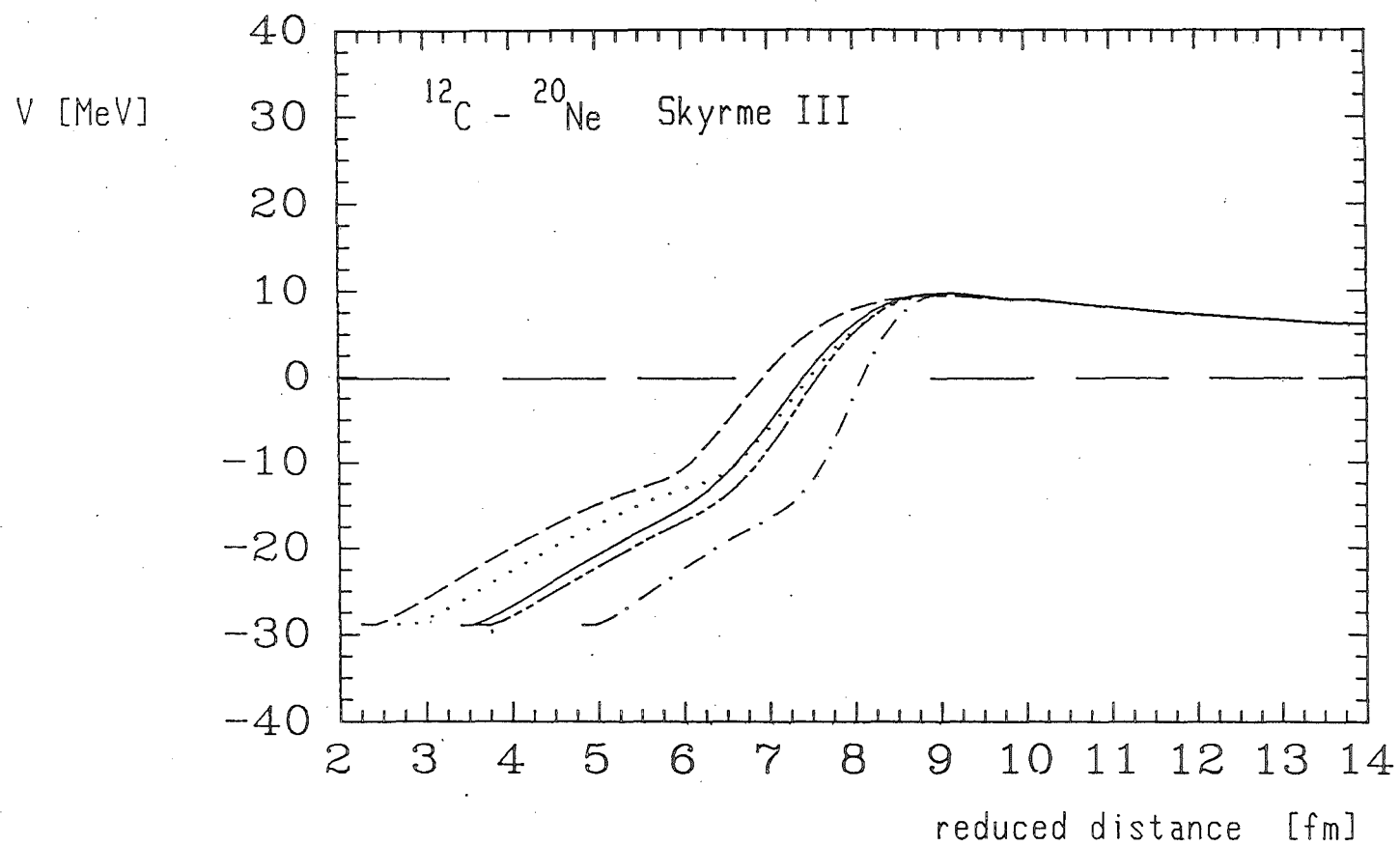


Abb. 20

Quadrupole-distance [fm]



ATDHF-path with ATDHF-mass —————

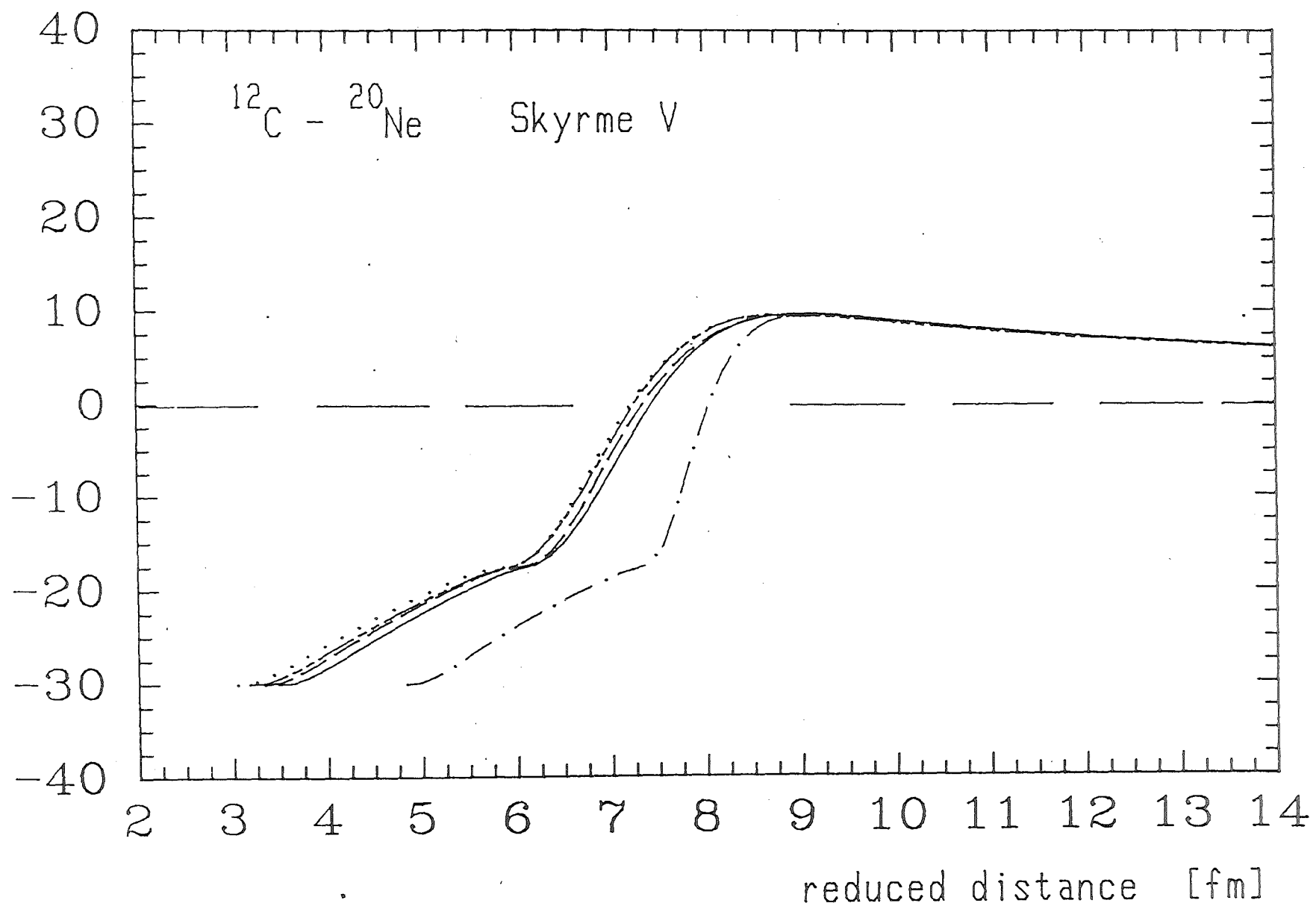
ATDHF-path with GCM-mass - - - - -

ATDHF-path with constant mass - . . . .

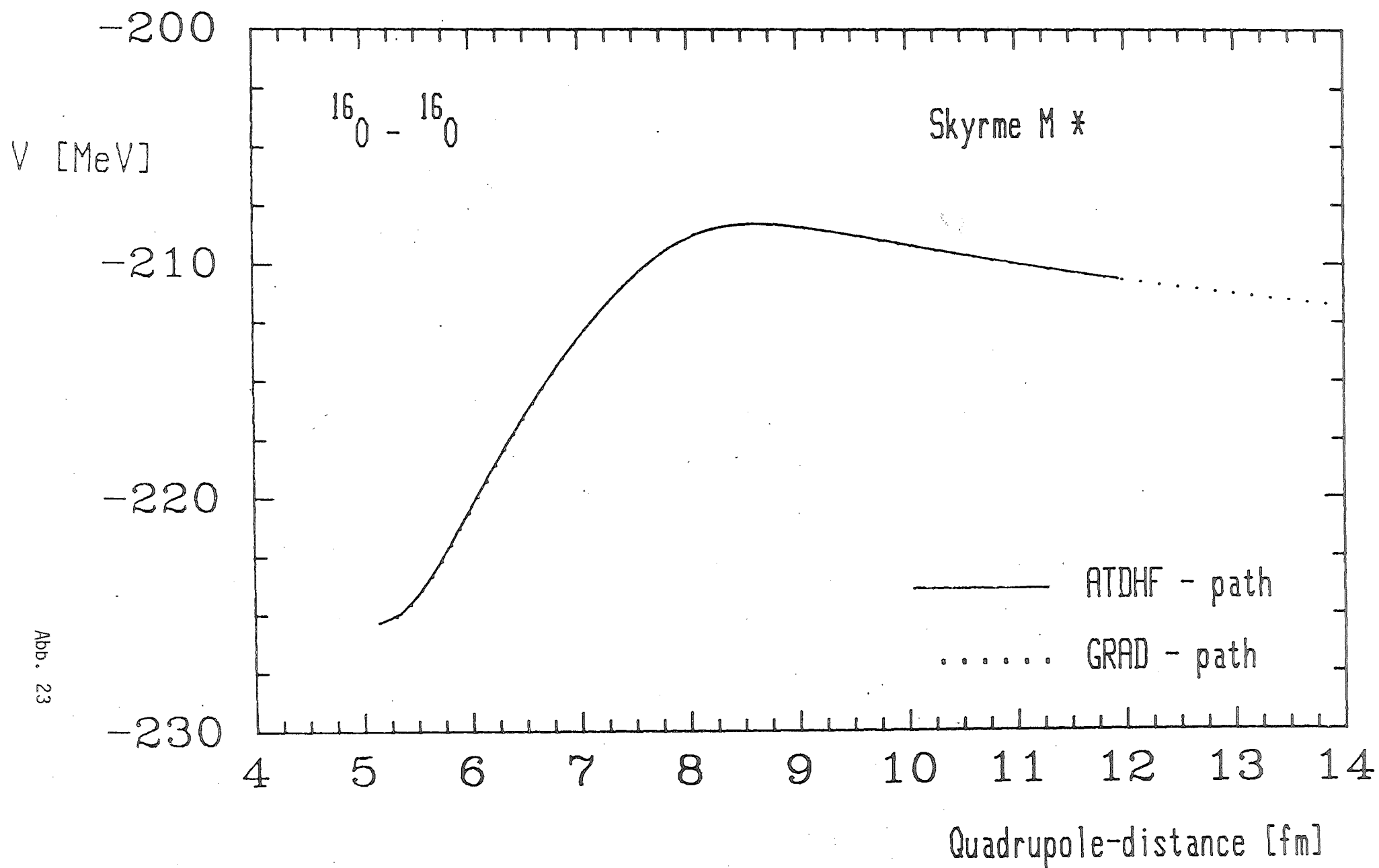
GRAD-path with ATDHF-mass - - - - -

GRAD-path with GCM-mass . . . . .

V [MeV]







Mass [ $m_n$ ]

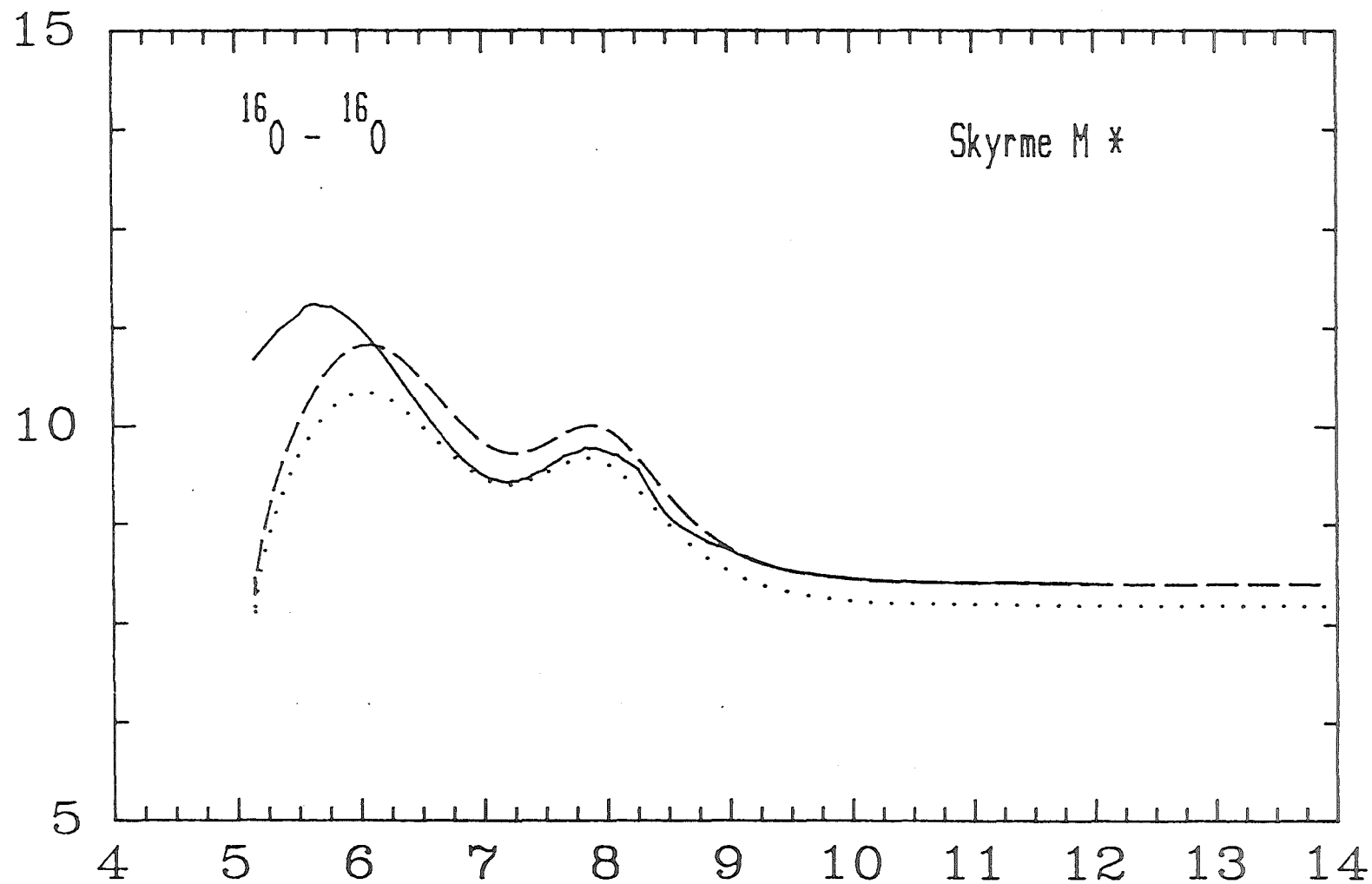


Abb. 24

—————

ATDHF-path with ATDHF-mass

- - - - -

GRAD-path with ATDHF-mass

.....

GRAD-path with GCM-mass

Quadrupole-distance [fm]

